



HIGHLIGHTS 2022

Helmholtz-Zentrum Berlin
für Materialien und Energie

DE

INHALT

VORWORT

Interview: Photovoltaik in entscheidender Phase	4
Europäische Pilotlinie für innovative Tandem-Solarzellen	6
Von der Labor- zur Industrieproduktion	7

HIGHLIGHTS AUS DER FORSCHUNG – ENERGIE

Neuer Weltrekord für Tandemsolarzellen	9
Silizium-Solarzellen mit Perowskit zu Tandem kombiniert	10
Prognose des Wirkungsgrads von Solarzellen	10
Tandemsolarzellen: Nanostrukturen helfen mehrfach	11
Perowskit-Solarzellen: Eigenschaften bleiben rätselhaft	11
Bessere Photoelektroden durch Blitz-Erhitzung	12
Tomographie von Kupfersulfid-Feststoffbatterien	12
Erste multimodale Analyse im Pouchzellenformat	13
Nanostrukturiertes Nickelsilizid als Katalysator	14
Grüner Wasserstoff: Raschere Fortschritte durch moderne Röntgenquellen	14
Photokatalyse: Prozesse bei der Ladungstrennung erfasst	15
Wie sich Photoelektroden bei Wasserkontakt verändern	16
Nanodiamanten als Photokatalysatoren	16

HIGHLIGHTS AUS DER FORSCHUNG – INFORMATION

Buckyballs auf Gold sind weniger exotisch als Graphen	18
Wärmedämmung für Quantentechnologien	18
Dynamik in 1D-Spinketten neu aufgeklärt	19
Wie Spin-Kopplung Sauerstoff katalytisch aktiviert	20
Ein neues Werkzeug zur Untersuchung der Chiralität	20
Ein neuer Weg zu spinpolarisierten Strömen	21

HIGHLIGHTS AUS DER FORSCHUNG – MATERIE

4.000 Proteinstruktur an BESSY II entschlüsselt	N 23
KI-Software schafft Durchblick bei komplexen Daten	23
Energereiche Röntgenstrahlen hinterlassen Spuren	N 24
Was passiert in Biofilmen?	N 24
Ein ultraschneller Röntgenblick in die elektronische Struktur von Photosäuren	N 25
Magnetische Nanopartikel in biologischen Trägern	N 25
Mit KI die „Fingerabdrücke“ von Molekülen errechnen	26
Wie Quantenkomplexität wächst	26
Monochromatoroptiken für den „tender“	
Röntgenbereich	26
Tautomere Gemische enträtselt	27

Strukturelle Unordnung und magnetische Eigenschaften in hochentropen Legierungen	28
Potentialflächen von Wasser erstmals kartiert	28
Höchste Oxidationsstufe von Rhodium entdeckt	28
Neuer magnetischer Splittingeffekt entdeckt	N 29
Einfluss von Protonen auf Wassermoleküle	N 29

VERSCHIEDENES

Zahlen und Fakten aus dem HZB	30
HZB unterzeichnet Charta der Vielfalt	31
40 Jahre Forschen mit Synchrotronlicht in Berlin	32
Kooperation für nachhaltiges Kerosin im Flugverkehr	32
Berufungen, Auszeichnungen und Preise	33
Royalere Besuch aus Schweden	33
Eröffnung der Helmholtz-SESAME-Beamline HESEB	34
Tomographie-Labor für die KI-unterstützte Batterieforschung	34
Lageplan und Impressum	35

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



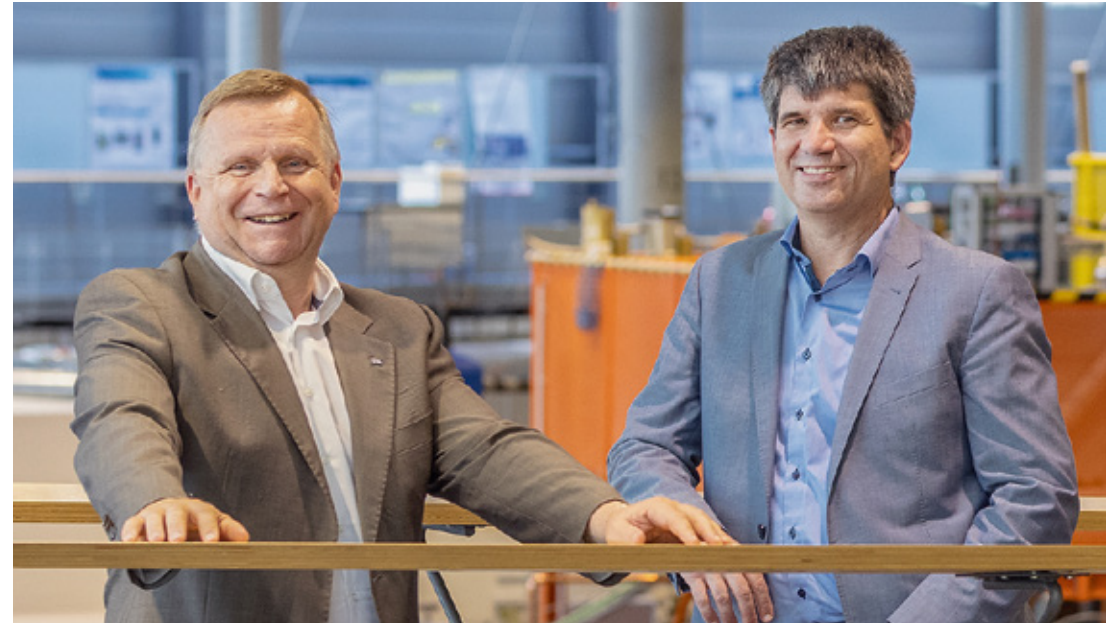
© S. Steinbach/HZB

VORWORT

Die Energieversorgung ist 2022 mit Wucht wieder ins Zentrum der öffentlichen Debatte gerückt. Nicht nur der Klimawandel, sondern auch die politische Weltlage zwingt unsere Gesellschaft dazu, rascher als bisher von Öl, Gas und Kohle loszukommen. Erneuerbare Energien sind Schlüsseltechnologien für den Klimaschutz. Aber auch Freiheit, Sicherheit und Wohlstand hängen vom Gelingen der Energiewende ab. Mit unserer Forschung leisten wir einen konkreten Beitrag dazu. Wir forschen an Materialien, die Energie effizient umwandeln oder speichern, wir entwickeln Solarzellen der nächsten Generation, neuartige Batterien, Quantenmaterialien für die Informationstechnologie sowie innovative Katalysatoren für die Produktion von „grünem“ Wasserstoff und nachhaltigen Brennstoffen.

Dabei sind wir sehr erfolgreich. So haben Teams aus dem HZB 2022 erneut einen Weltrekord für den Wirkungsgrad einer Tandemsolarzelle aufgestellt. Gleichzeitig haben die Fachleute am HZB die Anforderungen der Industrie hinsichtlich Aufskalierung und Kosten im Blick und arbeiten an verbesserten Herstellungsverfahren, in enger Kooperation mit unterschiedlichen Solarunternehmen. Technologietransfer ist für uns ein zentrales Anliegen, und wir wollen mit unserer Forschung dazu beitragen, die Industrie in Europa und der Region zu stärken.

In diesem Rückblick stellen wir Ihnen ausgewählte Forschungsergebnisse aus gut 600 wissenschaftlichen Publikationen vor, die im Lauf des Jahres 2022 erschienen sind. 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. Im Bereich Materie finden sich auch spannende Arbeiten von Forschungsgästen an BESSY II, die etwa biologische Proben im Röntgenlicht analysieren. Unsere Röntgenquelle ist hierfür ein unverzichtbares Werkzeug, das wir konsequent in Richtung „Energie-Synchrotron“ weiterentwickeln – nicht zuletzt mit dem in 2022 vorgeschlagenen und hervorragend begutachteten Ausbauprogramm BESSY II+.



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

© P. Dera/HZB

Uns ist sehr bewusst, dass Wissenschaft eine Teamleistung ist, die von Vielfalt lebt. Deshalb fördern wir die Diversität an unserem Forschungszentrum. Sie ist eine wichtige Voraussetzung für Kreativität und Bestandteil unserer Arbeitskultur. 2022 haben wir die Charta der Vielfalt unterschrieben, bei der sich 4900 Unternehmen öffentlich für ein wertschätzendes und vorurteilsfreies Arbeitsumfeld einsetzen. Das ist ein weiterer Ansporn für uns, den eingeschlagenen Weg weiterzugehen. Auch hierüber berichten wir in diesem Rückblick.

Bernd Rech
Wissenschaftlicher Geschäftsführer

Thomas Frederking
Kaufmännischer Geschäftsführer

„WIR BEFINDEN UNS GERADE IN EINER ENTSCHEIDENDEN PHASE FÜR DIE PHOTOVOLTAIK“

Der HZB-Forscher **Rutger Schlatmann** ist seit einem Jahr Vorsitzender der Plattform ETIP-PV, in der Vertreter*innen aus Wissenschaft, Industrie und Politik aus ganz Europa organisiert sind. Ein Gespräch über den aktuellen Boom – und darüber, warum in Sachen Photovoltaik der Zug für die Europäische Union noch nicht abgefahren ist.

Herr Schlatmann, als Sie sich vor einigen Jahrzehnten auf die Photovoltaik spezialisiert haben, war das ein Nischenthema. Ahnten Sie da schon, dass es einmal zu dem Boom kommen wird, den wir heute erleben?

Solche hellseherischen Fähigkeiten hätte ich tatsächlich gern! Es gab einige Indizien; so ist die Photovoltaik über die vergangenen 20 Jahre kontinuierlich gewachsen und es wurde zugleich immer deutlicher, wie wichtig es ist, die Klimakrise abzuwenden. Deshalb war ich zuversichtlich, dass der Markt in Europa weiter anziehen würde. Aber dass zwei so tiefe Zäsuren kommen würden wie die Corona-Pandemie und der Ukraine-Krieg, habe ich nicht kommen sehen.

Was haben diese Krisen mit der Photovoltaik zu tun – außer natürlich über den gestiegenen Bedarf an neuen Energiequellen?

Die Globalisierung wurde lange glorifiziert. Jetzt sieht man auf einmal, dass wir in Europa nicht einmal so

einen vermeintlich banalen Gegenstand wie eine Gesichtsmaske herstellen können, ohne dass die Lieferketten dafür bis nach Fernost reichen. In umso stärkerem Maße gilt das natürlich für komplexe Produkte wie etwa Medikamente, Halbleiter-Chips, aber eben auch Solarzellen.

Das ist der Blick von geostrategischer Seite. Wo steht die Photovoltaik heute aus technischer Sicht?

Als ich mit der Forschung angefangen habe, hat kaum jemand diesen Bereich ernst genommen. Und jetzt, seit einigen Jahren, hat Solarstrom die niedrigsten Herstellungskosten – er ist preiswerter als Strom aus Öl oder Gas und natürlich erst recht billiger als Atomenergie. Und dass, obwohl es immer noch ein enormes Potenzial für weitere technologische Entwicklung gibt. Wir befinden uns gerade in einer entscheidenden Phase für die Photovoltaik, und die gute Nachricht ist: Die Forschungslandschaft in Europa und speziell in Deutsch-

land ist viel stärker und größer, als man es anhand der industriellen Kapazitäten erwarten würde, die es auf diesem Gebiet hierzulande noch gibt.

In China sitzen aber auch leistungsstarke Photovoltaik-Forscher, oder?

Auf jeden Fall, man sollte das weder von der Quantität noch von der Qualität unterschätzen. Wir haben aber bei bestimmten Technologien die Nase vorn, die im Moment sehr angesagt sind, weil Deutschland da in den vergangenen zehn Jahren viele Forschungsgelder investiert hat. Denken Sie nur an die Perowskit-Tan-

„Die Forschungslandschaft in Europa und speziell in Deutschland ist viel stärker und größer, als man es anhand der industriellen Kapazitäten erwarten würde.“

demsolarzellen, die mit zwei übereinanderliegenden Schichten arbeiten: einer Silizium-Schicht und einer Perowskit-Schicht, die beide unterschiedliche Farbanteile des Sonnenlichts in Energie umwandeln und deshalb einen deutlich höheren Wirkungsgrad haben als herkömmliche Solarzellen. Da sind unheimliche Fortschritte gelungen beim Wirkungsgrad, aber auch bei der Stabilität. Allein am HZB haben wir ja mehrere

Gruppen dafür etabliert und neue Talente geholt. Das wird übrigens nicht nur in der Forschung wahrgenommen, sondern auch in der Industrie.

Das ist ein gutes Stichwort. Sie haben vor einem Jahr Ihr Amt als Vorstand der Europäischen Technologie- und Innovationsplattform für Photovoltaik angetreten. Was haben Sie seitdem schon Neues gelernt?

Ich habe vor allem tiefere Einblicke in die regulatorischen und politischen Rahmenbedingungen bekommen. Auf dem Feld ist unheimlich viel in Bewegung geraten. Das dominante Thema ist natürlich der sogenannte Inflation Reduction Act aus den USA, dieses enorme Programm, mit dem die Ansiedlung von Produktionskapazitäten unterstützt wird. Die Investitionsmöglichkeiten sind dermaßen attraktiv, dass ich im Moment bei Gesprächen mit Unternehmen häufig höre, dass sie eigentlich in Europa investieren wollten, aber die Unterschiede so groß seien, dass es sich lohne, doch lieber in die USA zu gehen und von dort die Ware nach Europa zu verschiffen.

Kann man in Europa nicht die Phase der traditionellen Silizium-Solarzellen quasi überspringen und gleich eine Produktion für die Tandem-Technologie aufbauen?

Nein, aus zweierlei Gründen würde das nicht funktionieren. Erstens ist der Zug für die Silizium-Zellen noch nicht abgefahren, im Gegenteil. Und zweitens müssen

„Die Fortschritte bei der Photovoltaik am HZB werden nicht nur in der Forschung, sondern auch in der Industrie wahrgenommen.“

wir in Europa erst wieder die gesamte Wertschöpfungskette aufbauen – und das können wir gut bei der Siliziumtechnologie machen. Die Solarfirmen benötigen zum Beispiel ein extrem transparentes Glas. Die Firmen, die so etwas herstellen können, gibt es in Europa, aber sie haben diese Sparten längst wieder geschlossen, weil es keine Nachfrage gab. Das gleiche gilt für etliche andere Komponenten, die für die Produktion von PV-Modulen nötig sind. Zum Glück ist das Knowhow dafür noch vorhanden – aber die Herstellung muss eben erst wieder hochgefahren werden.

Werden denn die Weichen dafür auch tatsächlich gestellt?

Mich verblüfft es immer wieder, wie die Politik in der EU läuft – wie manche Länder zum Beispiel einen sinnvollen Gesetzentwurf blockieren, um für sich selbst bei den Verhandlungen mehr rauszuholen. Aber ich glaube, dass sowohl der Europäischen Kommission als auch den nationalen Regierungen klar ist, wie groß der Handlungsdruck ist. Und es gibt ja auch Lichtblicke: Bei der Batterieherstellung etwa ist es ja gelungen, ein In-

Prof. Dr. Rutger Schlatmann leitet das Kompetenz-Zentrum Photovoltaik Berlin (PVcomB) am Helmholtz-Zentrum Berlin und lehrt als Professor an der Hochschule für Technik und Wirtschaft. Seit Oktober 2022 ist er Vorsitzender der Europäischen Technologie- und Innovationsplattform für Photovoltaik (ETIP PV); in diesem Beratungsgremium der Europäischen Kom-



mission sind Forschungseinrichtungen, Industrieunternehmen und politische Akteure zusammengeschlossen. Der gebürtige Niederländer studierte Physik und Groningen und Amsterdam. Viele Jahre arbeitete er auf verantwortungsvollen Positionen in der Industrieforschung, bevor er 2008 zum HZB wechselte. ©M.Setzpfandt/HZB

vestitionsklima zu schaffen, mit dem Europa wieder für eine Branche attraktiv wurde, die eigentlich schon abgewandert war.

Sind Sie mit Blick auf die PV-Industrie optimistischer oder pessimistischer geworden, seit Sie in Ihrem neuen Amt hinter viele Kulissen blicken können?

Ganz eindeutig: Ich bin durch das neue Amt optimistischer geworden.

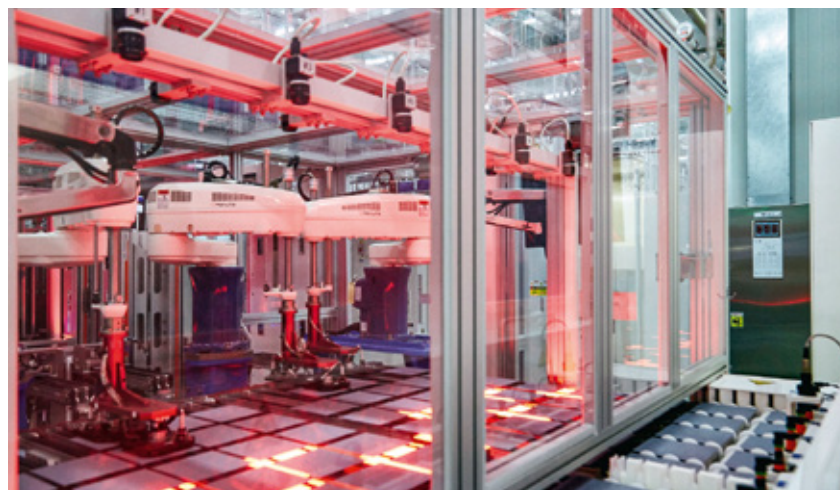
Das Gespräch führte Kilian Kirchgessner

EUROPÄISCHE PILOTLINE FÜR INNOVATIVE TANDEM-SOLARZELLEN

PEPPERONI ist ein vierjähriges Forschungs- und Innovationsprojekt, das im Rahmen von Horizon Europe kofinanziert und gemeinsam vom Helmholtz-Zentrum Berlin und Qcells koordiniert wird. Das Projekt soll dazu beitragen, die Markteinführung und Massenproduktion von Perowskit/Silizium-Tandem-Photovoltaik-Technologien voranzubringen.

Ziel von PEPPERONI ist es, Hindernisse für die Markteinführung der Tandem-Solartechnologie zu ermitteln und zu beseitigen und Grundlagen für neue Produktionskapazitäten in Europa zu schaffen. Das Projekt startete am 1. November 2022 mit der langfristigen Vision, Europa eine industrielle Führungsrolle in der PV-Produktion auf dem Weltmarkt zu ermöglichen. Im Rahmen von PEPPERONI wird am europäischen Hauptsitz von Qcells in Thalheim, Deutschland, eine Pilotlinie für Tandemzellen vom industriellen Typ eingerichtet, die innovative Anlagen, Prozesse und Materialien zur Herstellung von hoch-effizienten Tandemzellen und -modulen umfasst.

Mit dem Forschungs- und Innovationsprojekt soll eine schnelle und wettbewerbsfähige Massenproduktion von PV-Modulen mit hoher Leistung und langer Lebensdauer erreicht werden. „Diese Forschung verspricht, neue Wege bei der Weiterentwicklung der Perowskit-Silizium-Tandem-Solarzellen- und Modultechnologie zu beschreiten“, sagt



Blick auf eine Produktionslinie für Solarzellen bei Qcells.

Fabian Fertig, Director Global R&D Wafer & Cells bei Qcells. „In einer Zeit, in der das derzeitige Energiesystem einem noch nie dagewesenen Druck ausgesetzt ist, ist es spannend, diesen ersten und transformativen Schritt in Richtung einer industriellen Fertigung der nächsten Generation von PV-Technologien in Europa zu verwirklichen.“

Das Konsortium von PEPPERONI hat sich eine Menge vorgenommen. So soll eine Minimierung der Skalierungsverluste durch Innovationen bei den verwendeten Materialien und Anlagen erreicht werden. Neben der Entwicklung von Verfahren und Anlagen für die Dünnschichtabscheidung soll auch die Betriebsstabilität von Perowskiten durch eingehende Analysen der Leistungsverluste erweitert werden. Zudem gilt es, Risiken für die menschliche Gesundheit und die Umwelt zu beseitigen und eine robuste und wettbewerbsfähige europäische Innovationsbasis und PV-Lieferkette zu schaffen.

Der Ansatz von PEPPERONI ist, einen Typ von Silizium-Bottomzellen zu verwenden, der auf einer Technologie basiert, die weltweit bereits im Gigawatt-Maßstab produziert wird: die Q.ANTUM-Technologie. Die Abscheidung einer Perowskit-Topzelle auf Silizium-Bottomzellen in nur wenigen zusätzlichen Prozessschritten verspricht nicht nur höhere Modulwirkungsgrade, sondern ermöglicht auch eine kosteneffiziente Produktionssteigerung. „Am HZB haben wir die Tandemtechnologie im Labormaßstab auf Weltrekordniveau entwickelt“, erläutert Bernd Stannowski, Leiter der Abteilung Industriekompatible Prozesse, Solarzellen und

© Qcells

-module am HZB. „Wir freuen uns nun darauf, im PEPPERONI-Konsortium mit Partnern aus Wissenschaft und Industrie zusammenzuarbeiten, um diese neue und vielversprechende Technologie gemeinsam zu skalieren und in die Industrie zu übertragen.“

Qcells/red.

VON DER LABOR- ZUR INDUSTRIEPRODUKTION

Um Tandem-Solarzellen vom Labormaßstab in die Produktion zu überführen kooperiert das HZB mit dem Solarmodulhersteller Meyer Burger, der große Expertise in der Heterojunction-Technologie (HJT) für Silizium-Module besitzt, sowie weiteren Partnern aus der Forschung. Im Rahmen dieser Kooperation sollen **serienreife Silizium-Bottom-Zellen** auf Basis der Heterojunction-Technologie mit einer Top-Zelle auf Basis der Perowskit-Technologie kombiniert werden.

Für die Entwicklung der nächsten Generation von Hochleistungs-Solarzellen und -modulen arbeitet das HZB mit der Meyer Burger Technology AG zusammen. Das Schweizer Unternehmen kooperiert darüber hinaus mit dem CSEM aus der Schweiz, dem Fraunhofer-Institut für Solare Energiesysteme ISE in Freiburg und dem Institut für Photovoltaik an der Universität Stuttgart. Angestrebt wird die Industrialisierung der Perowskit-Tandemtechnologie, die in Zukunft die industrielle Fertigung von Solarzellen mit Wirkungsgraden von mehr als 30 Prozent ermöglichen soll.

Die Meyer Burger Technology AG ist ein Hersteller von qualitativ hochwertigen Solarmodulen auf Basis der Silizium-Heterojunction-Technologie (HJT). Das Forschungs- und Entwicklungsteam von Meyer Burger hat bereits in den vergangenen Jahren gemeinsam mit dem Team von Bernd Stannowski am HZB HJT-Zellen entwickelt, weil das HZB große Expertise im Bereich Perowskit-Solarzellen besitzt. In der jüngsten Zeit wurden, maßgeblich durch die Arbeiten der Gruppe um Steve Albrecht, Labor-Tandemsolar-

zellen, die Heterojunction und Perowskit kombinieren, mit Rekordwirkungsgraden von mehr als 32 Prozent erzielt.

Forschung bringt Arbeitsplätze in Europa

Allerdings haben solche Rekord-Tandemzellen nur die laborüblichen Flächen von einem Quadratzentimeter und werden zum Teil mit Prozessen hergestellt, die nicht skalierbar sind. „Wir freuen uns daher, dass wir mit Meyer Burger kooperieren, um diese fantastische Technologie in die Anwendung zu überführen“, sagt Stannowski, der die Kooperation am HZB leitet. Dabei kommt auch eine neue Clusteranlage (KOALA) zum Einsatz. Diese weltweit einzigartige Anlage, gefördert vom Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz (BMWK) und dem Forschungsministerium (BMBF), ermöglicht es, auf in der Industrie üblichen großen Wafern Perowskit/Silizium-Tandemsolarzellen im Vakuum herzustellen.

„Meyer Burger verfügt auf Basis langjähriger eigener Entwicklungen über ein umfassendes Portfolio an Prozessen,



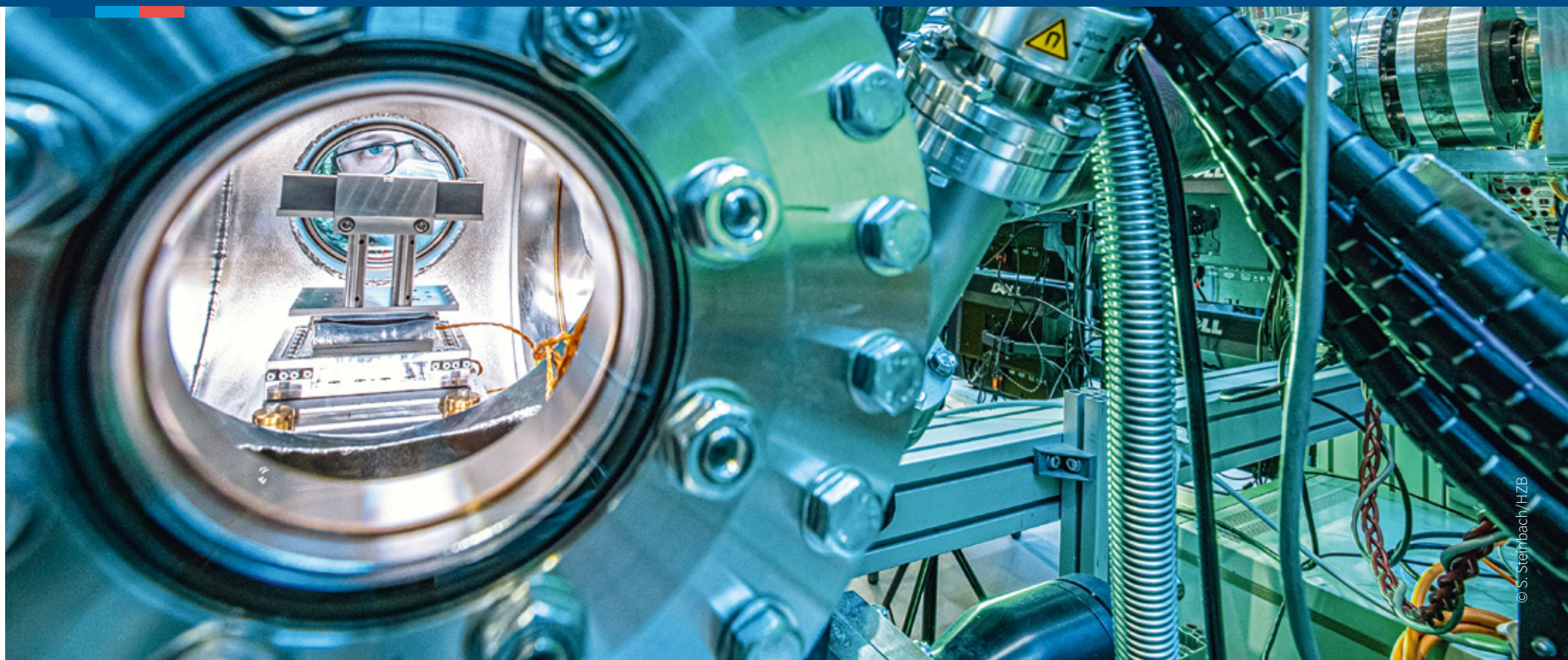
Die am HZB betriebene Clusteranlage ermöglicht es, großflächige Perowskit/Silizium-Tandemsolarzellen herzustellen. Die Anlage ist weltweit einzigartig und trägt dazu bei, neue industriennahe Prozesse, Materialien und Solarzellen zu entwickeln. © B. Stannowski/HZB

Technologien und Produktionstechniken für eine eigene potenzielle Massenfertigung von Tandemsolarzellen und -modulen“, sagt Marcel König, Leiter der Abteilung Forschung und Entwicklung bei Meyer Burger. „Dies umfasst die wesentlichen Fertigungsprozesse und -maschinen für Perowskit-Tandemsolarzellen auf Siliziumbasis sowie entsprechende Solarmodule mit Meyer Burgers proprietärer SmartWire-Verbindungstechnologie. In Kombination mit den Kompetenzen unserer Partner aus der Wissenschaft ist das ein einzigartiger Schlüssel zum Erfolg.“

„Meyer Burger fertigt in Europa und schafft dadurch hochwertige Arbeitsplätze. Dabei verwertet das Unternehmen Technologien, die in Europa entwickelt wurden“, sagt Rüdiger Schlatmann, Direktor des Kompetenzzentrum Photovoltaik Berlin (PVcomB) am HZB. Der neue Kooperationsvertrag ist auf drei Jahre angelegt. *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 chemischen Energie-Umwandlung und Speicherung. Grundlage dafür ist die Arbeit der Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler in den verschiedenen Laboren und an Messstationen von BESSY II. Das Spektrum reicht von der Batterieforschung bis zur Entwicklung katalytisch aktiver Materialien zur Erzeugung von grünem Wasserstoff oder zur Umwandlung von CO_2 . **Zu fast jeder Meldung gibt es eine wissenschaftliche Veröffentlichung. Klicken Sie dafür auf dieses Symbol:** ➔



NEUER WELTREKORD FÜR TANDEMSOLARZELLEN

Der Weltrekord von Tandemsolarzellen aus einer Silizium-Unterzelle und einer Perowskit-Topzelle liegt wieder beim HZB. Die neue Tandemsolarzelle wandelt 32,5 Prozent der einfallenden Sonnenstrahlung in elektrische Energie um. Das Zertifizier-Institut European Solar Test Installation (ESTI) in Italien hat die Tandemzelle vermesen und diesen Wert offiziell bestätigt. Außerdem wurde der Wert in die NREL-Übersicht zu Solarzelltechnologien eingetragen, die vom National Renewable Energy Lab, USA, gepflegt wird. „Dies ist ein wirklich großer Sprung nach vorne, den wir vor einigen Monaten noch nicht vorhergesehen haben. Alle beteiligten Teams am HZB, speziell die Teams aus dem PV-Kompetenzzentrum (PVcomB) und dem HySPRINT Innovation Lab, haben hier hervorragend und mit großer Hingabe zusammengearbeitet“, sagt Steve Albrecht, der ein großes Team am HZB zu Perowskit-Solarzellen leitet.

Sein Team nutzte eine verbesserte Perowskit-Verbindung und eine raffinierte Modifikation der Oberfläche. Die Postdocs Silvia Mariotti und Eike Köhnen haben eine Grenzflächenmodifikation entwickelt, die Verluste aus Ladungsrekombination weitgehend unterdrückt. Dabei gelang es ihnen, die grundlegenden Prozesse noch genauer zu analysieren und besser zu verstehen. Diese Entwicklungen wurden anschließend erfolgreich in Tandemsolarzellen übertragen und mit weiteren optischen Verbesserungen kombiniert.

Faszinierende Tandemtechnologie

Der Erfolg war nur durch die enge Zusammenarbeit mit weiteren Expertinnen und Experten möglich, die an der Herstellung und Entwicklung der Tandemzellen beteiligt waren. Durch die Kombination aller Modifikationen wurden Höchstwerte für die Photospannung (Leerlaufspannung) und der neue Rekordwert der Effizienz für diese faszinierende Tandemtechnologie erzielt.

In den vergangenen Jahren gab es eine kontinuierliche Steigerung der Wirkungsgradwerte durch Forschungseinrichtungen und Photovoltaik-Firmen weltweit. Teams aus dem HZB konnten Ende 2021 einen Rekordwert von knapp unter 30 Prozent erzielen. Sie hatten dafür spezielle, periodische Nanotexturen in die Solarzellen eingebracht. Im Sommer 2022 konnte dann eine Gruppe aus der Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) die 30-Prozent-Barriere durchbrechen. Nun liegt der Höchstwert mit 32,5 Prozent wieder am HZB. „Wir freuen uns sehr über den erneuten deutlichen Effizienzsprung. Dieser zeigt das hohe Potenzial der Perowskit/Silizium-Tandemsolarzellen, in den nächsten Jahren zu einer nachhaltigen Energieversorgung beizutragen“, sagt Albrecht.

Bernd Rech, der wissenschaftliche Geschäftsführer des HZB, betont: „Mit 32,5 Prozent ist der Solarzellenwirkungsgrad der HZB-Tandems jetzt in Bereichen, die bisher nur

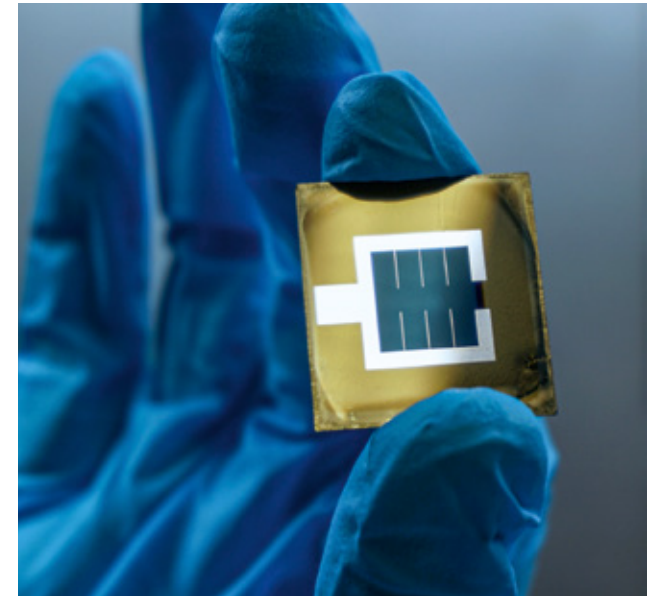


Foto der Perowskit/Silizium-Tandemsolarzelle. Zu sehen ist die aktive bläuliche Fläche in der Mitte des Wafers, die von der metallischen, silbrigen Elektrode eingeschlossen wird.

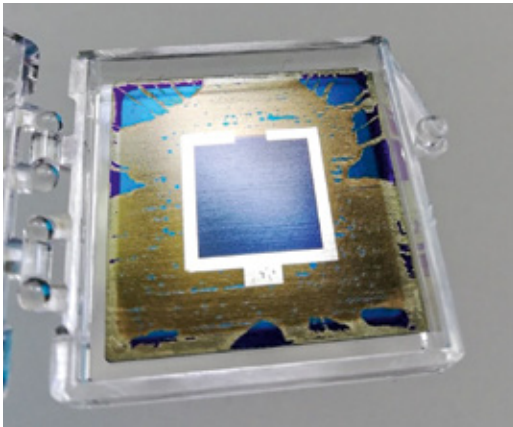
© J. Beckedahl/L. Zimmerman/HZB

von teuren III/V Halbleitern erreicht wurden.“ Damit konnten die Forscherinnen und Forscher in Europa in den vergangenen beiden Jahren spektakuläre Verbesserungen erzielen. *arö*

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. Schlattmann, M. Topič, L. Korte, A. Abate, B. Stannowski, D. Neher, M. Stoltefoht, T. Unold, V. Getautis, and S. Albrecht. DOI: [10.1126/science.abd4016](https://doi.org/10.1126/science.abd4016)

STANDARD-SILIZIUM-SOLARZELLEN MIT PEROWSKIT ZU TANDEM KOMBINIERT



Auf einer Standard-Silizium-Zelle hat das HZB-Team eine Perowskit-Topzelle aufgebracht. Diese Tandem-Solarzelle könnte mit weiteren Optimierungen hohe Wirkungsgrade erreichen. © S. Mariotti/HZB

Tandemzellen aus Silizium und Perowskit sind in der Lage, das breite Energiespektrum des Sonnenlichts effizienter in elektrische Energie umzuwandeln als die jeweiligen Einzelzellen. Zwei Teams vom HZB und dem Institut für Solarenergieforschung in Hameln (ISFH) haben erstmals eine Perowskit-Topzelle mit einer sogenannten PERC/POLO-Silizium-Zelle zu einem Tandem-Bauelement kombiniert. Das Besondere: PERC-Silizium-Zellen auf p-Typ Silizium gelten mit einem Marktanteil von mehr als 50 Prozent aller weltweit produzierten

Solarzellen als das Arbeitspferd der Photovoltaik. Sie sind weitgehend optimiert, temperatur- und langzeitstabil und damit ideal für die Kommerzialisierung einer Perowskit-Silizium Tandem-Technologie.

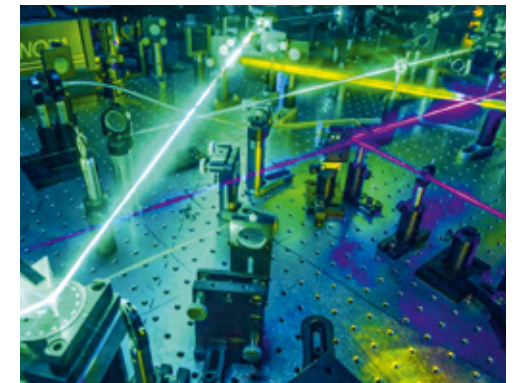
Die ersten Perowskit-PERC/POLO Tandemzellen erreichten auf einer aktiven Zell-Fläche von circa einem Quadratzentimeter einen Wirkungsgrad von 21,3 Prozent, also unterhalb dem einer optimierten PERC-Zelle. „Erste experimentelle Ergebnisse und optische Simulationen deuten aber darauf hin, dass wir die Leistung durch Prozess- und Schichtoptimierung erheblich verbessern können“, erklärt Lars Korte, der korrespondierende Autor der Studie. Erwartet wird ein möglicher Wirkungsgrad von 29,5 Prozent. arö →

Solar – RRL (2022): Monolithic Perovskite/Silicon Tandem Solar Cells fabricated using industrial p-type POLO/PERC Silicon Bottom Cell Technology. S. Mariotti, K. Jäger, M. Diederich, M. S. Härtel, B. Li, K. Sveinbjörnsson, S. Kajari-Schröder, R. Peibst, S. Albrecht, L. Korte, T. Wietler. DOI: 10.1002/solr.202101066

PROGNOSE DES WIRKUNGSGRADS VON SOLARZELLEN MIT TERAHERTZ- UND MIKROWELLENSPEKTROSKOPIE

Viele unterschiedliche Halbleitermaterialien kommen für Solarzellen in Frage. Nun zeigt eine Studie, wie sich mit Terahertz- (TRTS) und Mikrowellen-Spektroskopie (TRMC) zwei wichtige Materialeigenschaften deutlich präziser ermitteln lassen: die Mobilität und die Lebensdauer der Ladungsträger. Aus diesen Messdaten ist es möglich, den potenziellen Wirkungsgrad der Solarzelle vorherzusagen und die Verluste in der fertigen Zelle einzuordnen.

Allerdings unterscheiden sich die Messdaten aus der Literatur oft um Größenordnungen, so dass es schwierig war, daraus zuverlässige Berechnungen abzuleiten. „Diesen Unterschieden wollten wir auf den Grund gehen“, sagt Hannes Hempel aus dem HZB-Team um Thomas Unold. Dafür haben die HZB-Physiker Fachleute aus insgesamt 15 internationalen Laboren eingebunden und gemeinsam mit ihnen typische Fehlerquellen und Probleme der Messungen analysiert. „Wir glauben, dass diese Analyse für die Photovoltaik-Forschung von großem Interesse ist, weil sie den maximal möglichen Wirkungsgrad des Materials in einer Solarzelle vorhersagt und den Einfluss verschiedener Verlustmechanismen, wie Transportbarrieren, offenlegt“, sagt Unold. arö →

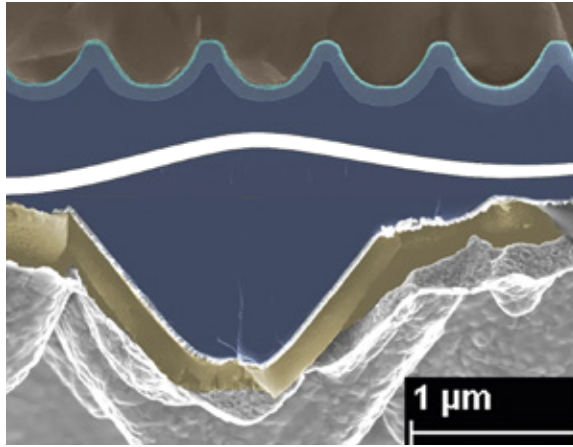


Im Femtosekunden-Laserlabor kann der Ladungstransport in Halbleitern mit Terahertz- und Mikrowellenspektroskopie untersucht werden. Dafür generieren Laserpulse zuerst Ladungsträger im Material, welche dann proportional zu ihrer Mobilität langwellige Strahlung (Terahertz oder Mikrowellen) absorbieren. © HZB

Advanced Energy Materials (2022): Predicting Solar cell performance from Terahertz and Microwave Spectroscopy. H. Hempel, T. J. Savenjie, M. Stolterfoht, J. Neu, M. Failla, V. C. Paingad, P. Kužel, E. J. Heilweil, J. A. Spies, M. Schleuning, J. Zhao, D. Friedrich, K. Schwarzburg, L. D. A. Siebbeles, P. Dörflinger, V. Dyakonov, R. Katoh, M. J. Hong, J. G. Labram, M. Monti, E. Butler-Caddle, J. Lloyd-Hughes, M. M. Taheri, J. B. Baxter, T. J. Magnanelli, S. Luo, J. M. Cardon, S. Ardo, and T. Unold. DOI: 10.1002/aenm.202102776

TANDEMSOLARZELLEN MIT PEROWSKIT: NANOSTRUKTUREN HELFEN MEHRFACH

Ende 2021 hatten drei Teams am HZB Perowskit-Silizium-Tandemsolarzellen mit einem Wirkungsgrad von knapp 30 Prozent vorgestellt. Dieser Wert hielt acht Monate lang den Weltrekord, eine sehr lange Zeit für dieses heiß umkämpfte Forschungsfeld. Dieser vorübergehende Rekordwert gelang ihnen mit nanooptischen Strukturierungen und Reflexionsbeschichtungen. „Unsere jeweiligen Kompetenzen ergänzen sich sehr gut“, sagt Christiane Becker,



Rasterelektronen-Mikroskopie von Perowskit-Silizium-Tandemsolarzellen im Querschnitt mit Nanotextur und Rückreflektorschicht (golden).
© P. Tockhorn/HZB

die mit dem Team um Bernd Stannowski (Silizium-Untierzelle) und Steve Albrecht (Perowskit-Oberzelle) die Weltrekordzelle entwickelt hat.

Beckers Team hat dafür eine sanft gewellte Nanotextur auf der Silizium-Oberfläche in die Tandemzelle eingebracht. „Überraschend war, dass diese Textur gleich mehrere Vorteile bringt“, betont Becker: „Die Nanotextur reduziert nicht nur wie erwartet die Reflexionsverluste, sondern führt auch noch dazu, dass sich der extrem dünne Film aus Perowskit deutlich regelmäßiger bildet.“ Außerdem reduziert eine dielektrische Pufferschicht auf der Rückseite des Siliziums die parasitäre Absorption bei Wellenlängen im nahen Infrarotbereich. Diese Ergebnisse sind nicht nur für Tandemsolarzellen aus Perowskit- und Silizium wertvoll, sondern auch für Leuchtdioden auf Perowskit-Basis. arö →

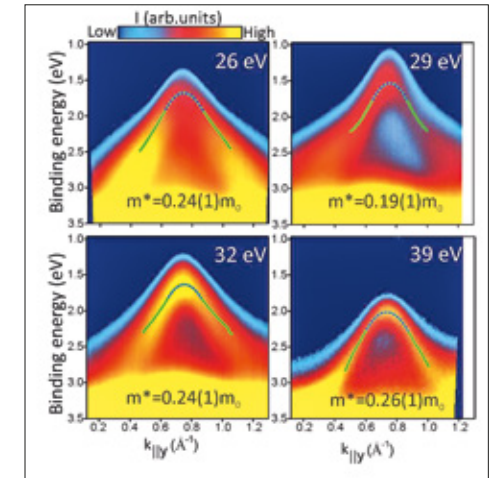
Nature Nanotechnology (2022): Nano-optical designs for high efficiency monolithic perovskite-silicon tandem solar cells. Tockhorn, J. Sutter, A. Cruz, P. Wagner, K. Jäger, D. Yoo, F. Lang, M. Grischek, B. Li, J. Li, O. Shargaieva, E. Unger, A. Al-Ashouri, E. Köhnen, M. Stolterfoht, D. Neher, R. Schlattmann, B. Rech, B. Stannowski, S. Albrecht, C. Becker. DOI: 10.1038/s41565-022-01228-8

PEROWSKIT-SOLARZELLEN: EIGENSCHAFTEN BLEIBEN NOCH RÄTSELHAFT

Um die besonders günstigen Eigenschaften von Perowskit-Halbleitern für Solarzellen zu erklären, kursieren verschiedene Hypothesen. Eine geht davon aus, dass sich in Bleihalogenid-Perowskiten Polaronen bilden, die zum Ladungstransport beitragen. Solche Polaronen sind Schwingungen von Ionen im Kristallgitter, die wegen ihrer Ladung auf die Bewegung von Elektronen reagieren. Da Perowskite aus negativen (Blei) und positiven Ionen (Cäsium) bestehen, lag die Vermutung nahe, dass Polaronen eine Rolle spielen. Mithilfe von Messungen mit winkelaufgelöster Photoemissions-Spektroskopie (ARPES) an BESSY II konnte Maryam Sajedi aus dem Team um Oliver Rader diese These widerlegen.

Eine zweite Hypothese vermutet einen gigantischen Rashba-Effekt, der die Verluste durch Rekombination von Ladungsträgern begrenzen soll. Der Rashba-Effekt beruht auf einer starken Spin-Bahn-Kopplung, die bei Blei-Halogenid-Perowskiten durch Blei erzeugt werden könnte. Sajedi untersuchte verschiedene Proben mit Spin-ARPES.

„Dieser Effekt ist mindestens hundertmal kleiner als angenommen“, kommentiert sie das Ergebnis. „Damit haben wir experimentell zwei verbreitete Hypothesen zu den Transporteigenschaften in Perowskiten widerlegen können“, sagt Oliver Rader. Das ist wichtig, um bei der Optimierung dieser Materialien an den richtigen Hebeln ansetzen zu können. arö →

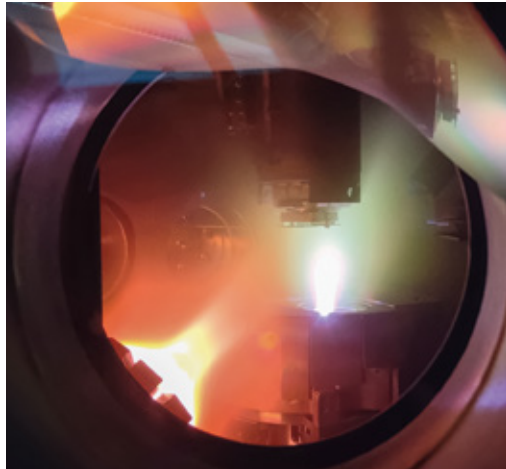


ARPES-Daten für verschiedene Photoenergien (entlang einer bestimmten Richtung des reziproken Gitters). Sie zeigen: Die effektive Masse erhöht sich wenig.
© HZB

Phys. Rev. Lett. (2022): Is There a Polaron Signature in Angle-Resolved Photoemission of CsPbBr₃? M. Sajedi, M. Krivenkov, D. Marchenko, J. Sánchez-Barriga, A. K. Chandran, A. Varykhalov, E. D. L. Rienks, I. Aguilera, S. Blügel, and O. Rader. DOI: 10.1103/PhysRevLett.128.176405

SOLARER WASSERSTOFF: BESSERE PHOTOELEKTRODEN DURCH BLITZ-ERHITZUNG

Um mit Sonnenlicht Wasser elektrolytisch aufzuspalten, werden Photoelektroden gebraucht. Am HZB-Institut für Solare Brennstoffe beschäftigen sich mehrere Teams mit ihrer Entwicklung. Kostengünstige Metalloxid-Dünnschichten mit hoher elektronischer



Herstellung der Photoelektroden: Ein intensiver Laserpuls trifft auf ein Target mit dem Material, verwandelt es in Plasma und scheidet es als Dünnschicht auf einem Substrat ab.
© R. Gottesman/HZB

Qualität eignen sich sehr gut dafür, doch ihre Herstellung ist komplex. Insbesondere lässt sich die Qualität der Metalloxid-Dünnschichten nur durch eine thermische Behandlung bei sehr hohen Temperaturen verbessern. Dabei würde jedoch das darunter liegende leitfähige Glassubstrat schmelzen.

Ein Team am HZB-Institut für Solare Brennstoffe um Ronen Gottesman hat dieses Dilemma nun gelöst: Durch blitzartige Aufheizung der Metalloxid-Dünnschicht mit Hilfe von Hochleistungslampen. Dabei wird die Dünnschicht auf 850 °C erhitzt, ohne das darunter liegende Glassubstrat zu schmelzen. „Die Hitze reduziert effizient strukturelle Defekte, Fallenzustände, Korngrenzen und

Phasenverunreinigungen“, sagt Gottesman. Sein Team hat das an Photoelektroden aus Ta₂O₅, TiO₂ und WO₃ demonstriert, die auf 850 °C erhitzt wurden, ohne die Substrate zu beschädigen. Die neue Methode war auch bei einem Photoelektrodenmaterial erfolgreich, das als sehr guter Kandidat für die solare Wasserspaltung gilt: α-SnWO₄. Hier konnte eine Leistungssteigerung um 25 Prozent gegenüber dem bisherigen Rekord erzielt werden.

arö →

ACS Energy Letters (2022): Shining a Hot Light on Emerging Photoabsorber Materials: The Power of Rapid Radiative Heating in Developing Oxide Thin-Film Photoelectrodes. R. Gottesman, I. Peracchi, J. L. Gerke, R. Irani, F. F. Abdi, and R. van de Krol. DOI: [10.1021/acsenerylett.1c02220](https://doi.org/10.1021/acsenerylett.1c02220)

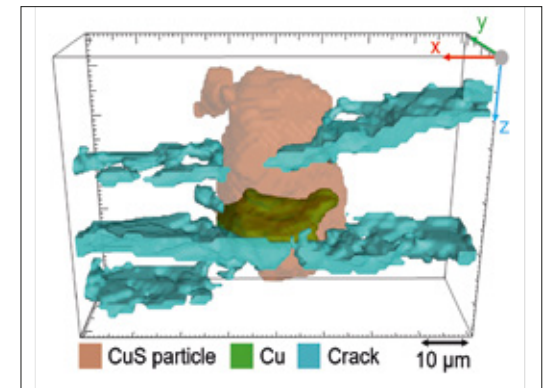
TOMOGRAPHIE ZEIGT HOHES POTENZIAL VON KUPFER-SULFID-FESTSTOFFBATTERIEN

Feststoffbatterien gelten als aussichtsreiche Batterietechnologie der Zukunft. Gegenüber Lithiumionenbatterien, die aktuell in Mobiltelefonen, Laptops und Elektrofahrzeugen eingesetzt werden, versprechen sie noch höhere Energiedichten und Sicherheit. Einer Gruppe aus den Helmholtz-Zentren Berlin und Hereon, der Humboldt-Universität zu Berlin und der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung gelang es, die Prozesse innerhalb einer solchen Feststoffbatterie während des Ladens und Entladens zu beobachten.

Die Arbeitsgruppen von Philipp Adelhelm und Ingo Manke untersuchten das Verhalten von Kupfersulfid als Kathode in einer Feststoffbatterie. Als Anode wurde Lithium eingesetzt. Eine Besonderheit der Batterie ist, dass sich bei der Entladung große Kupferkristallite bilden. Mit Hilfe von Röntgentomographie ließ sich die Bildung dieser Kristallite untersuchen. So konnte die Entlade- und Ladereaktion in 3D nachvollzogen und zum ersten Mal die Bewegung der Kathodenpartikel innerhalb der Batterie verfolgt werden. Zudem zeigte sich, dass sich die Rissbildung durch höheren Druck effektiv verringern lässt. „Die Ergebnisse geben detaillierte Einblicke in das Innenleben einer Feststoffbatterie und zeigen, wie sich deren Eigenschaften verbessern lassen“ erklären Zhenggang Zhang und Kang Dong, die gemeinsamen Erstautoren der Publikation.

arö →

Advanced Energy Materials (2022): Phase Transformation and Microstructural Evolution of CuS Electrodes in Solid-State Batteries Probed by in-situ 3D X-ray Tomography. Z. Zhang, K. Dong, K. A. Mazzio, A. Hilger, H. Markötter, F. Wilde, T. Heinemann, I. Manke, P. Adelhelm. DOI: [10.1002/aenm.202203143](https://doi.org/10.1002/aenm.202203143)



3D Rekonstruktion der Bildung eines Kupferkristallits in einem Kupfersulfidpartikel (CuS) während der Entladung einer Lithium-CuS-Feststoffbatterie. Die Volumenausdehnung kann dabei zur Bildung von Rissen (blau) führen.

© K. Dong / HZB

LITHIUM-SCHWEFEL-AKKUS: ERSTE MULTIMODALE ANALYSE IM POUCHZELLENFORMAT

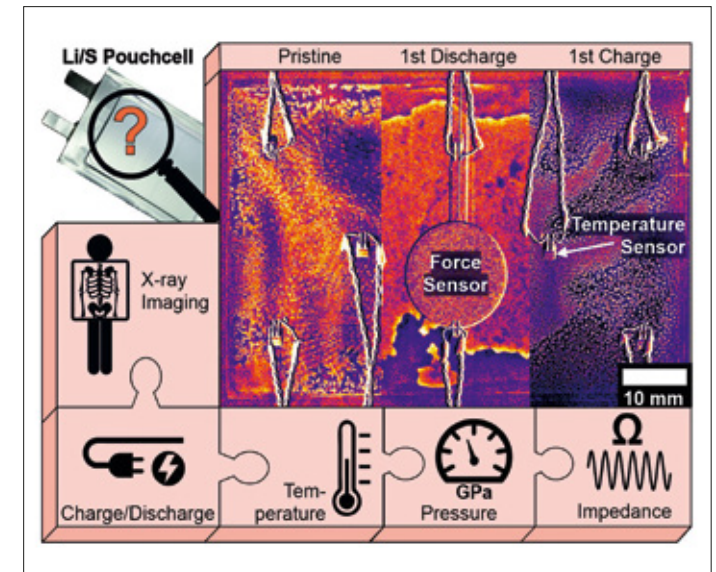
Lithium-Schwefel-Akkus (Li/S) haben nicht nur eine theoretische Energiedichte von 2500 Wattstunden je Kilogramm, die deutlich höher als die von konventionellen Lithium-Ionen-Akkus ist, sondern sie verfügen auch über umweltfreundlichere Kathodenmaterialien. Allerdings verändert sich das aktive Material mit zunehmender Anzahl von Ladezyklen: Die metallische Lithiumanode korrodiert, die Kapazität sinkt rasch. Mit innovativen Elektrolyten und raffinierten Additiven wird versucht, diese Alterung zu bremsen. Bisher wurden jedoch vor allem Li/S-Akkus im Knopfzellendesign untersucht, wo diese Reaktionen sozusagen im Elektrolyten getränkt stattfinden.

Für die Industrie sind jedoch andere Formate wie Rundzellen, prismatische Zellen oder Pouchzellen von besonderem Interesse. In diesen Formaten ist die Elektrolytmenge äußerst gering, was besonders hohe Energiedichten ermöglicht. Am HZB wurden nun erstmals multimodale operando Untersuchungen an Li/S Pouchzellen im Rahmen des BMBF-geförderten Projektes „HiPoLiS“ durchgeführt. In Zusammenarbeit mit Teams der TU Dresden sowie des Fraunhofer-IWS hat ein Team um Sebastian Risse einlagige Li/S-Zellen mit unterschiedlichen Elektrolyten untersucht. „Wir müssen zunächst die Prozesse in monolagigen Zellen verstehen, bevor wir auch mehrfache Lagen in Pouchzellen wissenschaftsbasiert optimieren können“, ist Risse überzeugt.

Radiographie mit Sensordaten

Für ihre Studie kombinierten sie Auswertungen der Messdaten mit den Analysen der Röntgenradiographie, die in enger Kooperation mit der Gruppe um den HZB-Bildgebungsexperten Ingo Manke entstanden. „So konnten wir Aussagen über die Bildung und Ablagerung von Schwefelpartikeln und Polysulfiden im Lauf der Ladezyklen treffen“, sagt Rafael Müller, der als Postdoc in der Elektrochemie-Gruppe von Risse forscht. Dabei zeigte sich auch, wie stark der Einfluss des genutzten Elektrolyten auf die Partikelbildung ist. In der multimodalen Messzelle, die Müller zusammen mit Risse entwickelt hat, befinden sich unterschiedliche Sensoren: Sie erfassen die elektrochemische Impedanz, die Temperatur, aber auch mechanische Kräfte auf den Elektroden. Zusätzlich wird die Pouchzelle während des gesamten Betriebs (operando) mit Röntgenlicht durchleuchtet, um eine Radiographie zu erstellen, aus der sich auf die chemischen Abscheidungsprozesse schließen lässt.

Um weitere Fortschritte auf Basis dieses Zellformats zu machen, wurde bereits 2021 am HZB ein Pouchzellenlabor aufgebaut. Zur Herstellung dieser Zellen werden rechteckige Elektroden im Scheckkartenformat aufeinandergestapelt und – lediglich von einer dünnen Separatorfolie getrennt – in eine versiegelbare Tasche (Pouch) gesteckt. Pouchzellen benötigen im Vergleich zu Knopfzellen nur wenig Elektrolyt, um den Ladungs-



Die Radiographien zeigen die Zelle vor (links) und nach der ersten Entladung (mitte) sowie nach der ersten Wiederaufladung (rechts), die Schwefelpartikel sind als helle Flecken sichtbar. Das multimodale Messverfahren ermöglicht es, Pouchzellen mit unterschiedlichen Elektrolyten und Additiven zu vergleichen. © R. Müller, S. Risse/HZB

transport zu gewährleisten. „Das wirkt sich auf diese Prozesse sehr stark aus und muss daher direkt in einem industriell relevanten Zellformat untersucht werden“, sagt Risse. arö ↻

Advanced Energy Materials (2022): Operando Radiography and Multimodal Analysis of Lithium-Sulfur Pouch Cells – Electrolyte Dependent Morphology Evolution at the Cathode. R. Müller, I. Manke, A. Hilger, N. Kardjilov, T. Boenke, F. Reuter, S. Dörfler, T. Abendroth, P. Härtel, H. Althues, S. Kaskel, S. Risse. DOI: 10.1002/aenm.202103432

NANOSTRUKTURIERTES NICKELSILIZID GLÄNZT ALS KATALYSATOR FÜR DIE ELEKTROLYSE

Elektrische Energie aus Wind oder Sonne lässt sich als chemische Energie in Form von Wasserstoff speichern. Voraussetzung dafür ist die effiziente Elektrolyse von Wasser mit kostengünstigen Katalysatoren. Für die Herstellung von Katalysatormaterialien auf Nickelbasis, einem korrosionsbeständigen und kaum toxischen Metall, setzte man bislang meist auf energieintensive Hochtemperaturverfahren. Ein Team von HZB und TU Berlin um Prashanth Menezes hat einen „sanften“ chemischen Weg gefunden, um einen effizienten Katalysator herzustellen: „Wir haben das Element Nickel mit Silizium, dem zweithäufigsten Element in der Erdkruste, kombiniert und über eine chemische

Reaktion eine Nanostrukturierung erreicht. Das daraus resultierende Material hat hervorragende katalytische Eigenschaften“, sagt Menezes.

Im Vergleich zu modernen Katalysatoren auf Nickel-, Kobalt-, Eisen-, Ruthenium- und Iridiumbasis ist das nanoporöse Ni_2Si wesentlich aktiver und bleibt unter industriellen Bedingungen über längere Zeit stabil. Um das Verhalten von Ni_2Si genauer zu verstehen, kombinierte das Team verschiedene Messmethoden, darunter Elementaranalysen, Elektronenmikroskopie und

Aus kristallinem Nickelsilizid (links) wird durch eine chemische Umwandlung nanostrukturiertes Material mit exzellenten katalytischen Eigenschaften, sowohl für die elektrolytische Aufspaltung von Wasser als auch für die Produktion wertvoller Nitril-Verbindungen.

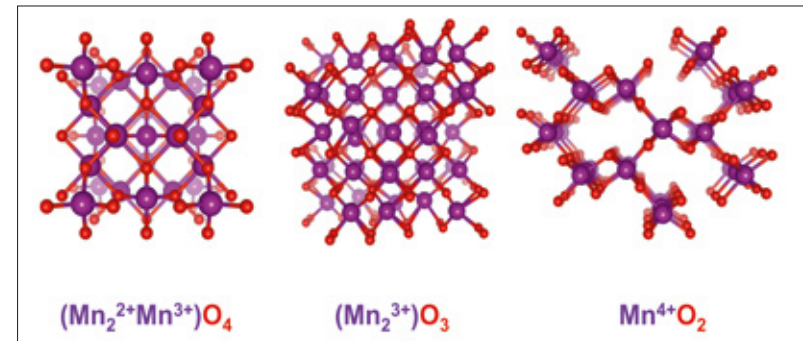
© P. Menezes /HZB/TU Berlin

moderne spektroskopische Messungen bei BESSY II. „In Zukunft könnten sogar industrielle alkalische Wasserelektrolyseure mit einer Beschichtung aus diesem nanoporösen Nickelsilizid ausgestattet werden“, sagt Menezes.

arö 

Advanced Energy Materials (2022): Nanostructured Intermetallic Nickel Silicide (Pre)Catalyst for Anodic Oxygen Evolution Reaction and Selective Dehydrogenation of Primary Amines. I. Mondal, J. N. Hausmann, G. Vijaykumar, S. Mebs, H. Dau, M. Driess, and P. W. Menezes. DOI: 10.1039/D1EE00650A

GRÜNER WASSERSTOFF: RASCHERE FORTSCHRITTE DURCH MODERNE RÖNTGENQUELLEN



Manganoxide kommen in verschiedenen strukturellen Varianten vor. Das macht sie zu einer spannenden Materialklasse für Elektrokatalysatoren.

© M. Risch/HZB

Ebenso wie nanostrukturiertes Nickelsilizid (siehe nebenstehenden Beitrag) gelten auch Manganoxide als spannende Materialklasse für Elektrokatalysatoren für die Produktion von grünem Wasserstoff. Marcel Risch untersucht mit seinem Team in der Nachwuchsgruppe „Gestaltung des Sauerstoffentwicklungsmechanismus“ einen wichtigen Prozess bei der Elektrokatalyse von Wasser, um ihn wirtschaftlich effizienter zu gestalten.

Manganoxide kommen jedoch in vielen verschiedenen strukturellen Varianten vor. „Ein entscheidendes Kriterium für die Eignung als Elektrokatalysator ist die Oxidationszahl des Materials und wie sie sich im Lauf der Reaktion verändert“, erläutert Risch. Informationen darüber bringt die Röntgenabsorptionsspektroskopie (XAS). Das Team um Risch hat eine Elektrolyse-Zelle konstruiert, die XAS-Messungen während der Elektrolyse ermöglicht. Kombiniert mit elektrochemischen Messungen ergibt sich aus den Messdaten damit ein deutlich besseres Verständnis des Materials während der Elektrokatalyse. Die benötigte hohe Intensität der Röntgenstrahlung liefert die Synchrotronlichtquelle BESSY II. Risch sieht noch großes Potenzial für die Anwendung von XAS auf dem Weg zu preiswerten, umweltfreundlichen und vor allem langlebigen Katalysatoren.

arö 

Angewandte Chemie (2022): What X-ray absorption spectroscopy can tell us about the active state of earth-abundant electrocatalysts for the oxygen evolution reaction. M. Risch, D. M. Morales, J. Villalobos, D. Antipin. DOI: 10.1002/ange.202211949

PHOTOKATALYSE: PROZESSE BEI DER LADUNGSTRENNUNG EXPERIMENTELL ERFASST

Mit Hilfe von photokatalytisch aktiven Partikeln könnte künftig Wasser in Wasserstoff und Sauerstoff aufgespalten werden, um preiswert grünen Wasserstoff zu produzieren: Dabei aktiviert das Sonnenlicht in diesen Photokatalysatoren Ladungsträger, die dann räumlich getrennt werden und die elektrolytische Wasserspaltung vorantreiben. Allerdings sind heutige Photokatalysatoren noch entweder sehr teuer oder wenig effizient.

Metalloxidpartikel gelten als günstige Kandidaten mit großem Potential: Bei der Aktivierung von Ladungsträgern durch Licht überlagern sich jedoch mehrere Prozesse, die mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten und auf verschiedenen räumlichen Skalen stattfinden. Um solche Prozesse experimentell zu beobachten, werden Methoden benötigt, die Zeitaufösungen bis hinunter zu Femtosekunden bieten, aber auch längere Prozesse beobachten können, die innerhalb von Mikrosekunden und langsamer ablaufen.

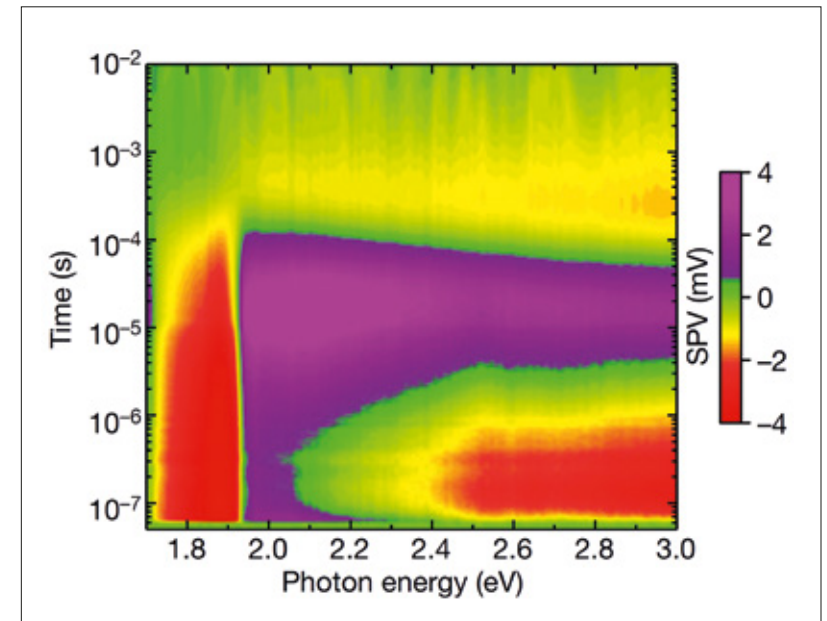
An mikrokristallinen Kupfer(I)oxid-Partikeln hat dies nun ein Team aus dem Dalian National Laboratory for Clean Energy, China, geschafft. Mit rasch aufeinanderfolgenden mikroskopischen Aufnahmen der zeitaufgelösten Photoemissions-Elektronen-Mikroskopie zeigten sie, dass einer dieser Prozesse in den Cu_2O -Partikeln extrem schnell abläuft – in weniger als Pikosekunden (10^{-12} s): Nach Anregung mit Licht werden Elektronen quasi bal-

listisch auf die sogenannten {001}-Facetten von Cu_2O -Partikeln übertragen.

Prozesse auf mikrokristallinen Partikeln untersucht


Um einen zweiten Prozess experimentell zu beobachten, war jedoch eine andere Methode erforderlich: Denn photogenerierte „Löcher“ wandern zu den {111}-Facetten und werden dort durch Defekte eingefangen. Diesen wichtigen Prozess konnte Thomas Dittrich mit Transienter Oberflächenphotospannungs-Spektroskopie (SPV-Spektroskopie) beobachten, einer von ihm am HZB entwickelten Methode. „Wir stellten fest, dass der Löcher-einfang relativ langsam stattfand, im Lauf von Mikrosekunden“, erklärt er.

Zusammengenommen ermöglichen die Ergebnisse erstmals, Prozesse, die die Photokatalyse limitieren, auf mikrokristallinen Partikeln mit hoher Orts- und Zeitaufklärung über weite Bereiche zu untersuchen und besser zu verstehen. „Mit der Transienten SPV-Spektroskopie können wir auch andere Halbleiter und Grenzflächen untersuchen, die beispielsweise für Anwendungen von der Photovoltaik über die Photokatalyse bis zur Hochleistungselektronik relevant sind“, sagt Dittrich. Auch an



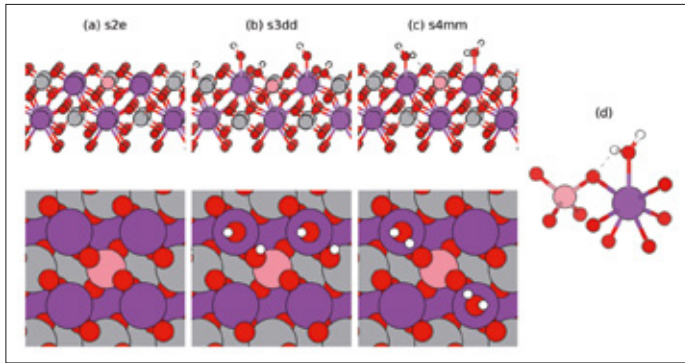
Die Photospannungen sind in Abhängigkeit von der Photonenenergie (x-Achse) und der Zeit (Y-Achse) aufgetragen. Positive SPV-Signale entsprechen der Relaxation von eingefangenen Löchern, negative SPV-Signale der Relaxation von eingefangenen Elektronen.

© T. Dittrich/HZB

organischen Halbleitern oder Ultrabreitband-Halbleitern wie Diamant lassen sich interessante Einsichten in Relaxationsprozesse gewinnen. „Vielleicht führt unsere Publikation in Nature dazu, diese vielseitige Methode bekannter zu machen“, sagt Dittrich. arö 

Nature (2022): Spatiotemporal imaging of charge transfer in photocatalyst particles. R. Chen, Z. Ren, Y. Liang, G. Zhang, T. Dittrich, R. Liu, Y. Liu, Y. Zhao, S. Pang, H. An, C. Ni, P. Zhou, K. Han, F. Fan and C. Li. DOI: [10.1038/s41586-022-05183-1](https://doi.org/10.1038/s41586-022-05183-1)

WIE SICH PHOTOELEKTRODEN IM KONTAKT MIT WASSER VERÄNDERN



Untersuchung der Bildung von Polaronen an BiVO_4 : (a) unberührte Oberflächenplatte mit Oberflächenpolaron, (b) einfach-hydroxyliertes Oberflächenpolaron mit dissoziierten Wassermolekülen und (c) Oberflächenpolaron mit zwei Wassermolekülen, die auf ein bestimmtes VO_4 ausgerichtet sind. Die Bi-Atome sind violett, V-Atome grau, O-Atome rot und H-Atome weiß dargestellt; das rosafarbene V-Atom bezeichnet die Stelle, an der die Bildung eines Elektronenpolarons initiiert wird. (d) zeigt die lokale Koordinationsumgebung von Bi und V der Hauptstruktureinheit. © W. Wang et al.

Halbleitermaterialien wie BiVO_4 kommen als Photoelektroden zur solaren Wasserstoffherzeugung in Frage. Bisher war jedoch nicht klar, welche Auswirkungen der Kontakt mit Wassermolekülen auf die elektronischen Eigenschaften der Oberfläche hat. Dieser Frage sind David Starr und Marco Favaro vom HZB-Institut für Solare Brennstoffe nachgegangen. Sie untersuchten Einkristalle von mit Molybdän dotiertem BiVO_4

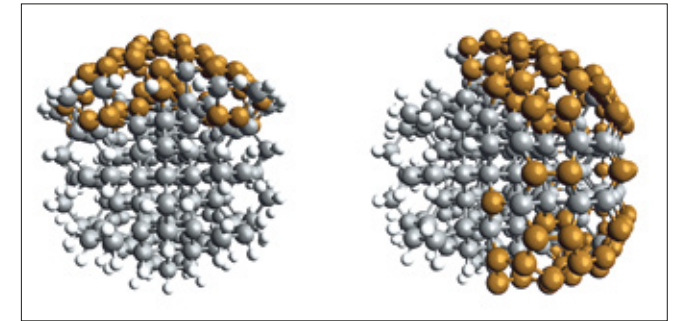
unter Wasserdampf mit resonanter Photoemissionsspektroskopie an der Advanced Light Source am Lawrence Berkeley National Laboratory.

Ein Team um Giulia Galli von der University of Chicago führte anschließend Dichtefunktionaltheorieberechnungen durch, um die Beiträge von einzelnen Elementen und Elektronenorbitalen zu den elektronischen Zuständen voneinander zu trennen. Die Kombination von Messungen und Berechnungen zeigte, dass sich aufgrund von überschüssiger Ladung sogenannte Polaronen bilden: elektrisch negativ geladene, lokalisierte Zustände, an die sich Wassermoleküle leicht anlagern und dann dissoziieren können. Die Ergebnisse liefern wertvolle Einblicke und helfen bei der Entwicklung von effizienten und langlebigen Photoanoden für die grüne Wasserstoffproduktion. arö →

J Am Chem Soc. (2022): Influence of Excess Charge on Water Adsorption on the $\text{BiVO}_4(0_{10})$ Surface. W. Wang, M. Favaro, E. Chen, L. Trotochaud, H. Bluhm, K.-S. Choi, R. van de Krol, D. E. Starr, G. Galli. DOI: 10.1021/jacs.2c07501

NANODIAMANTEN ALS PHOTOKATALYSATOREN MIT SONNENLICHT AKTIVIERBAR

Um chemische Reaktionen in einem wässrigen Medium katalytisch zu beschleunigen, kommt es darauf an, zunächst Elektronen aus einem Katalysator herauszulösen. Das kann mit Licht gelingen. Seit einigen Jahren stehen daher sogenannte Nanodiamant-Materialien im Fokus der Forschung: Es sind preiswerte Nanopartikel aus Kohlenstoff, deren Oberflächen im Vergleich



Die Illustration zeigt zwei Varianten von Nano-Diamant-Materialien mit unterschiedlichen Oberflächen: $\text{C}_{230}\text{H}_{106}$ links, $\text{C}_{286}\text{H}_{68}$ rechts. Die sp^3 -C-Atome (Diamant) sind dunkelgrau, die sp^{3x} -C-Atome (Fulleren-artig) braun und die H-Atome hellgrau dargestellt. © T. Kirschbaum/HZB

zum Volumen sehr groß sind. Sie benötigen jedoch energiereiches UV-Licht für die Anregung. Weil sie so extrem winzig sind, können sich an den Oberflächen unter Umständen aber molekulare Zustände etablieren, die auch sichtbares Licht absorbieren.

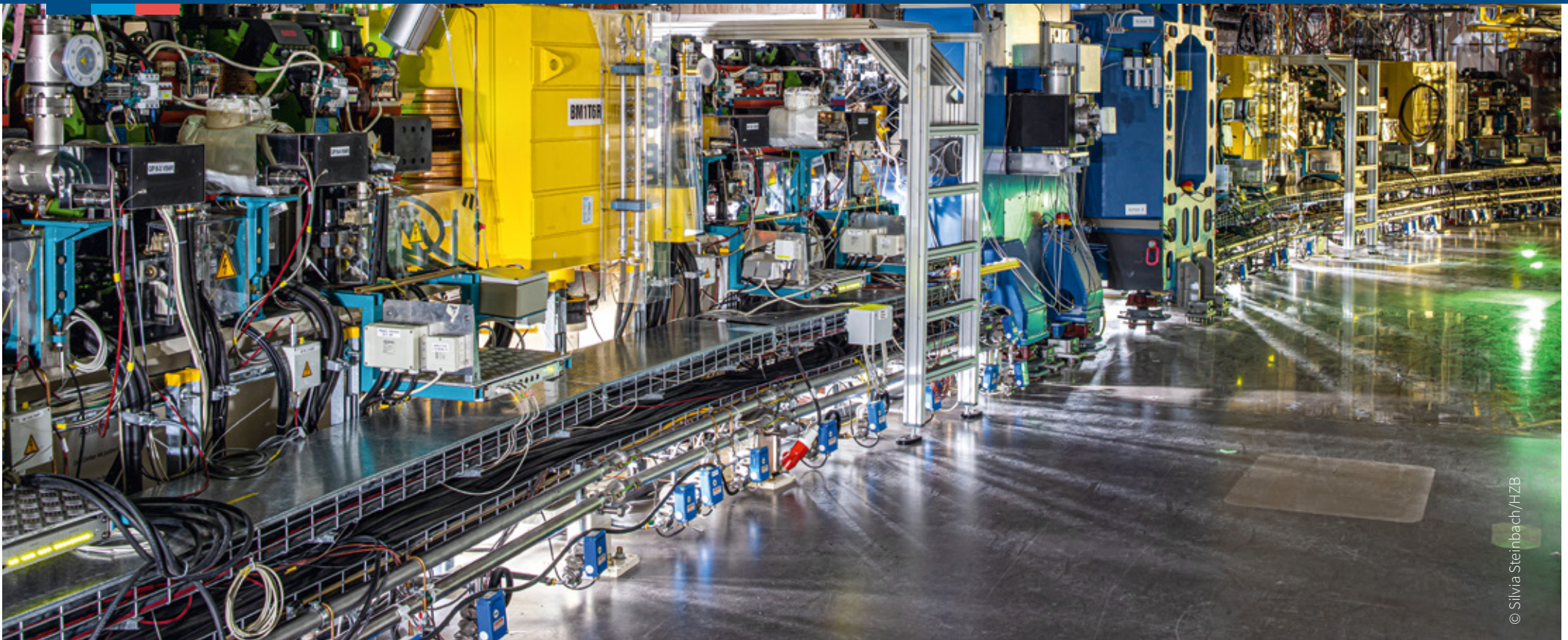
Ein Team am HZB hat verschiedene Nanodiamant-Materialien während der Anregung mit UV- und sichtbarem Licht untersucht. Die Prozesse wurden dabei mit extrem hoher Zeitauflösung analysiert. „Der Wasserstoff an den Oberflächen erleichtert die Emission von Elektronen erheblich“, erklärt Tristan Petit, Nanodiamant-Experte am HZB. „Dabei ist eine bestimmte Kombination aus Wasserstoff sowie Fulleren-artigen Teilchen an den Oberflächen der Nanopartikel ideal“, sagt er. Das Theorieteam um Annika Bande steuerte Modellierungen zur Interpretation der Spektren bei. Die Arbeit beweist, dass die Emission von gelösten Elektronen aus Nanodiamanten in Wasser mit sichtbarem Licht möglich ist und Nanodiamant-Materialien als Photokatalysatoren geeignet sind. arö →

Nanoscale (2022): Early dynamics of the emission of solvated electrons from nanodiamonds in water.

F. Buchner, T. Kirschbaum, A. Venerosy, H. Girard, J.-C. Arnault, B. Kiendl, A. Krueger, K. Larsson, A. Bande, T. Petit, C. Merschjann. DOI: 10.1039/D2NR03919B

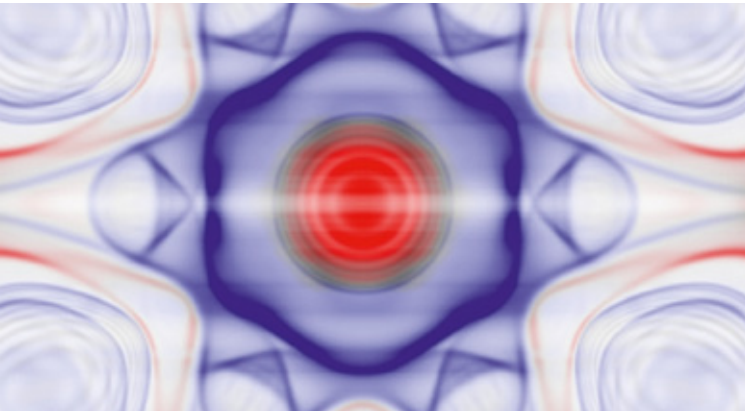
HIGHLIGHTS AUS DER FORSCHUNG – INFORMATION

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, die Zugriffsgeschwindigkeit auf gespeicherte Inhalte sowie der Energieverbrauch von Informationstechnik verbessert und neue Anwendungsgebiete erschlossen werden. **Zu fast jeder Meldung gibt es eine wissenschaftliche Veröffentlichung. Klicken Sie dafür auf dieses Symbol:** ➔



BUCKYBALLS AUF GOLD SIND WENIGER EXOTISCH ALS GRAPHEN

Graphen besteht aus Kohlenstoff-Atomen, die sich zu einer flachen Bienenwabenstruktur vernetzen. Das Material besitzt eine überraschend hohe mechanische Stabilität sowie spannende elektronische Eigenschaften, weil sich die Elektronen wie masselose Teilchen verhalten. Eine Studie legte nahe, dass eine künstliche Variante von Graphen mit Hilfe von



Mit Berechnungen auf Basis der Dichtefunktionaltheorie und Messdaten aus der spinaufgelösten Photoemission untersuchte das Team den Ursprung der sich wiederholenden Au(111)-Banden und löste sie als tiefe Oberflächenresonanzen auf. ©HZB

C_{60} -Molekülen, sogenannten Buckyballs, hergestellt werden könnte. Von diesen müsste nur eine gleichmäßige Schicht auf Gold aufgedampft werden, damit die Goldelektronen die besonderen Eigenschaften von Graphen annehmen.

Diesen Effekt hat ein Team um Andrei Varykhalov experimentell überprüft. Sie nutzten dabei die besonders präzise winkelaufgelöste ARPES-Spektroskopie an

BESSY II, mit der sich sogar Elektronenspins analysieren lassen. „Wir sehen in unseren Messdaten einen parabelförmigen Zusammenhang zwischen Impuls und Energie, also ein ganz normales Verhalten“, erklärt Maxim Krivenkov, Erstautor der Studie. „Diese Signale stammen von den Elektronen tief aus dem Gold- oder Kupfer-Substrat und damit nicht aus der Schicht, die von den Buckyballs beeinflusst werden könnte.“ Als künstliches Graphen kann die Buckyball-Schicht auf Gold daher nicht gelten. arö →

Nanoscale (2022): On the problem of Dirac cones in fullerenes on gold. M. Krivenkov, D. Marchenko, M. Sajedi, A. Fedorov, O. J. Clark, J. Sánchez-Barriga, E. D. L. Rienks, O. Rader, and A. Varykhalov. DOI: 10.1039/D1NR07981F

WÄRMEDÄMMUNG FÜR QUANTENTECHNOLOGIEN

Neue energieeffiziente IT-Bau-elemente arbeiten häufig nur bei extrem tiefen Temperaturen stabil. Daher kommt es entscheidend auf eine sehr gute Wärmeisolierung solcher Elemente an. Auf diesem Weg ist nun ein Team um Klaus Habicht aus dem HZB einen großen Schritt vorangekommen. Mit einem neuartigen Sinterverfahren stellten sie Proben aus Silizium und Silizium-Aluminium her, denen mittels elektrochemischen Ätzverfahren Mikrostrukturen hinzugefügt wurden, die den Wärmetransport unterdrücken.

Wärmeleitung funktioniert über Phononen, das sind Schwingungen im Kristallgitter. Mikrostrukturen wie Poren, Nanopartikel und Domängengrenzen können je nach Größe und Anordnung Phononen zerstreuen und damit die Wärmeleitung reduzieren. Mit einem Modell berechneten die Forschenden das Verhalten der Phononen in Proben mit unterschiedlichen Mikrostrukturen. „Bei diesem Modell können wir die Beiträge von Nanopartikeln und Poren zur Wärmeleitfähigkeit deutlich voneinander trennen“, erklärt Habicht. Die experimentellen Ergebnisse, die am Rasterelektronenmikroskop des HZB erzielt wurden, bestätigen das neue Modell. „Das Verständnis der grundlegenden Transportprozesse hilft uns dabei, maßgeschneiderte Materialien mit stark reduzierter Wärmeleitfähigkeit zielgerichtet herzustellen und weiter zu entwickeln“, sagt Danny Kojda, Erstautor der Studie. arö →



Elektronenmikroskopische Aufnahme einer Silizium-Probe mit Nanokristalliten unterschiedlicher Orientierung (farbig), Poren (schwarz) und dem von der Bildbearbeitungssoftware erkannten Porennetzwerk (weiße Gitterlinien). ©: D. Kojda/HZB

Nano Research (2022): Characterization and modeling of the temperature-dependent thermal conductivity in sintered porous silicon-aluminum nanomaterials. D. Kojda, T. Hofmann, N. Gostkowska-Lekner, and K. Habicht. DOI: 10.1007/s12274-022-4123-y

QUANTENMATERIALIEN: DYNAMIK IN 1D-SPINKETTEN NEU AUFGEKLÄRT

Quantenmaterialien zeichnen sich durch makroskopische Eigenschaften aus, die vor allem durch die quantenphysikalische Wellenfunktion von Elektronen geprägt sind. Sie können zum Teil auf Wechselwirkungen zwischen Elektronen zurückgeführt werden, wie etwa beim Ferromagnetismus, Antiferromagnetismus und der Supraleitung. Es gibt jedoch auch Phänomene, die vom topologischen Charakter der Wellenfunktion abhängen, beispielsweise bei topologischen Isolatoren und Dirac-Halbleitern. Zu den möglichen Anwendungsgebieten von Quantenmaterialien gehören die Spin-basierte Elektronik (Spintronik) und Quantenrechner.

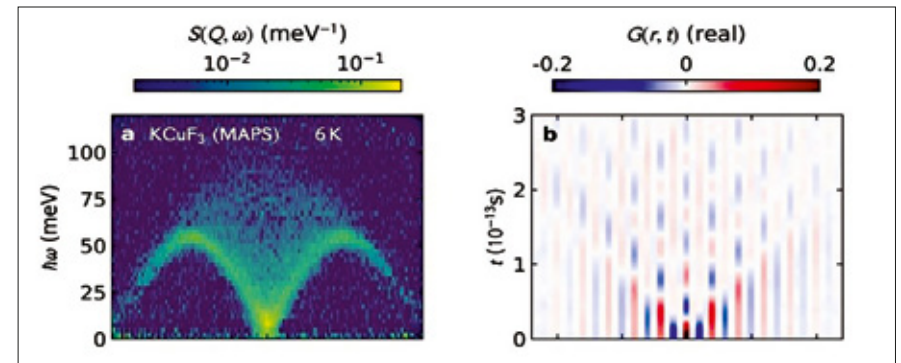
Die Neutronenstreuung gilt als die Methode der Wahl, um magnetische Strukturen und Anregungen in Quantenmaterialien zu untersuchen. Die Auswertung von Messdaten aus den 2000er-Jahren mit neuen Methoden hat erstmals wesentlich tiefere Einblicke in ein Modellsystem – die 1D-Heisenberg-Spinketten – geliefert. Damit steht ein neuer Werkzeugkasten für die Erforschung zukünftiger Quantenmaterialien zur Verfügung. Kalium-Kupfer-Fluorid KCuF_3 gilt dabei als das einfachste Modellmaterial für eine sogenannte Heisenberg-Quantenspinkette: Die Spins wechselwirken mit ihren Nachbarn antiferromagnetisch entlang einer einzigen Richtung (eindimensional) und unterliegen den Gesetzen der Quantenphysik.

Mitreißende Spin-Dynamik

„Wir haben die Messungen an diesem einfachen Modellsystem an der Spallationsneutronenquelle ISIS in England schon vor einiger Zeit durchgeführt, als ich noch Postdoc war“, sagt Bella Lake, die das HZB-Institut Quantenphänomene in neuen Materialien leitet. „Unsere Ergebnisse, die wir 2005, 2013 und erneut 2021 veröffentlicht haben, haben wir nun jeweils mit neuen Theorien verglichen“, erklärt Lake. So ist es dem Team um Alan Tennant und Allen Scheie gelungen, deutlich tiefere Einblicke in die Wechselwirkungen zwischen den Spins und deren räumliche und zeitliche Entwicklung zu gewinnen. „Bei der Neutronenstreuung stößt man einen Spin so an, dass er umkippt. Dadurch entsteht eine Dynamik, ähnlich wie ein Kielwasser, wenn ein Schiff durch das Wasser fährt, das seine Nachbarn und deren Nachbarn beeinflussen kann“, erklärt Tennant.


Neuer Werkzeugkasten

„Neutronenstreuungsdaten werden als Funktion der Energie und des Wellenvektors gemessen“, sagt Scheie. „Unser Durchbruch bestand darin, die räumliche und zeitliche Entwicklung der Spins mit mathematischen Methoden wie der Back-Fourier-Transformation abzubilden.“



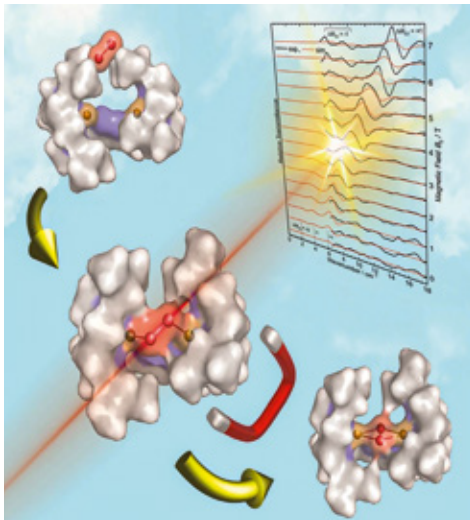
Die Daten aus der Neutronenstreuung (links) geben Auskunft über absorbierte Energien im reziproken Raum. Mit der neuen Auswertung war es möglich, Aussagen über neue magnetische Zustände und deren zeitliche Entwicklung im Realraum zu erhalten (rechts). Die Farben Blau und Rot kennzeichnen die beiden entgegengesetzten Spinrichtungen. © HZB

In Kombination mit anderen theoretischen Methoden erhielt das Team Informationen über die Wechselwirkungen zwischen den Spinzuständen und deren Dauer und Reichweite sowie Einblicke in die sogenannte Quantenkohärenz, die als Ursache für bestimmte makroskopische Eigenschaften gilt.

Die Arbeit bietet damit einen neuen Werkzeugkasten für die Analyse von Neutronenstreuungsdaten, um das Verständnis von technologisch relevanten Quantenmaterialien zu vertiefen. *red.* 

Nature Communications (2022): Quantum wake dynamics in Heisenberg antiferromagnetic chains. A. Scheie, P. Laurell, B. Lake, S. E. Nagler, M. B. Stone, J.-S. Caux, and D. A. Tennant. DOI: 10.1038/s41467-022-33571-8

WIE DIE SPIN-KOPPLUNG DIE KATALYTISCHE AKTIVIERUNG VON SAUERSTOFF BEEINFLUSST



Symbolbild: katalytische Aktivierung von molekularem Sauerstoff durch Kupferkomplexe.
© T. Lohmiller/HZB

Molekularer Sauerstoff (O_2) ist ein bevorzugtes Oxidationsmittel der Green Chemistry. Allerdings erfordert die Aktivierung von O_2 und die Kontrolle seiner Reaktivität eine präzise Einstellung der Spinzustände in den reaktiven Zwischenprodukten. In der Natur wird dies durch Metalloenzyme erreicht, die O_2 an Eisen- oder Kupferionen binden. Bei Dikupfer-Metalloproteinen des Typs III, die am Sauerstofftransport beteiligt sind, war über den genauen Prozess bisher nur wenig bekannt. Durch ein ausgeklügeltes Ligandendesign ist es einer Arbeitsgruppe der Universität Göttingen gelungen, eine Serie von Modellkomplexen zu isolieren, die das Anfangsstadium der Sauerstoffbindung an Dikupfer-Stellen nachbilden.

Ein Team am EPR4Energy-Joint lab von HZB und MPI CEC ergänzte diesen Durchbruch in der chemischen Synthese durch einen neuen Ansatz der THz-EPR-Spektroskopie. Damit konnte der funktionsbestimmende antisymmetrische Austausch in gekoppelten Dikupfer(II)-Komplexen untersucht und die Gesamtheit der Spinzustandsübergänge im System nachgewiesen werden. „Neben dem Erkenntnisgewinn über dieses wichtige System eröffnet unsere Methode die Möglichkeit, bisher nicht zugängliche Spin-Spin-Wechselwirkungen in einer Vielzahl neuartiger katalytischer und magnetischer Materialien zu untersuchen“, erklärt Thomas Lohmiller, einer der Erstautoren der Studie.

arö

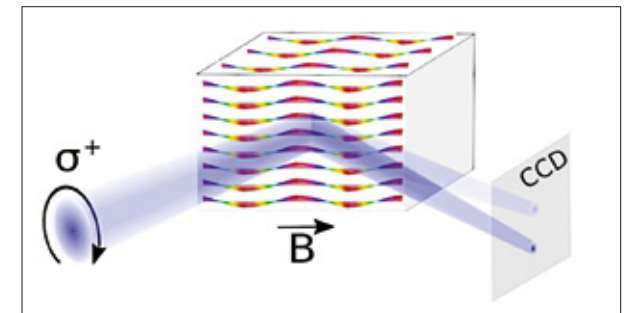
JACS Au (2022): Antisymmetric Spin Exchange in a μ -1,2-Peroxodicopper(II) Complex with an Orthogonal Cu–O–O–Cu Arrangement and $S = 1$ Spin Ground State Characterized by THz-EPR. T. Lohmiller, C. Spyra, S. Dechert, S. Demeshko, E. Bill, A. Schnegg, and F. Meyer. DOI: 10.1021/jacsau.2c00139

SPINTRONIK: EIN NEUES WERKZEUG AN BESSY II ZUR UNTERSUCHUNG DER CHIRALITÄT

Informationen über komplexe magnetische Strukturen sind entscheidend für das Verständnis und die Entwicklung spintronischer Materialien. Mit ALICE II steht an BESSY II ein neues Instrument zur Verfügung, um genau diese Informationen zu gewinnen. Entwickelt wurde es im Rahmen eines vom BMBF und HZB geförderten Projekts von Florin Radu und der Konstruktionsabteilung am HZB in enger Zusammenarbeit mit Christian Back von der TU München. „ALICE II verfügt über eine einzigartige Fähigkeit: Es ermöglicht magnetische Röntgenstreuung im reziproken Raum mit einem neuen großflächigen Detektor bis zu den höchsten erlaubten Reflexionswinkeln“, erklärt Radu.

Um die Leistungsfähigkeit des neuen Instruments zu demonstrieren, untersuchten die Forschenden eine polierte Probe von Cu_2OSeO_3 . Dies ist ein Mott-Isolator mit einer kubischen Kristallstruktur, die jedoch keine Inversionssymmetrie aufweist. Mit zirkular polarisierter Röntgenstrahlung konnte die Gruppe helikale und konische magnetische Modulationen als Satellitenreflexionen beobachten. „Mehr noch, die so ermittelten Spin-Texturen enthalten viel Information“, betont Radu. Dies zeigt einen neuen Weg, um chirale und polare magnetische Texturen zu untersuchen, und zwar mit höchster räumlicher Auflösung und auf sehr kurzen Zeitskalen, wie sie für Synchrotron-Röntgenexperimente typisch sind.

Das Bild illustriert den Haupteffekt: Ein zirkular polarisierter weicher Röntgenstrahl wird an einem Kristall gestreut, der eine helikale magnetische Ordnung aufweist. Dies führt zu zwei Streustrahlen unterschiedlicher Intensität.



Das Bild illustriert den Haupteffekt: Ein zirkular polarisierter weicher Röntgenstrahl wird an einem Kristall gestreut, der eine helikale magnetische Ordnung aufweist. Dies führt zu zwei Streustrahlen unterschiedlicher Intensität.
© F. Radu/HZB

arö

Science and Technology of Advanced Materials (2022): Chiral surface spin textures in Cu_2OSeO_3 unveiled by soft x-ray scattering in specular reflection geometry. V. Ukleev, C. Luo, R. Abrudan, A. Aqeel, C. H. Back, and F. Radu. DOI: 10.1080/14686996.2022.2131466

EIN NEUER WEG ZU SPINPOLARISIERTEN STRÖMEN

Die zweite Hälfte des 20. Jahrhunderts war das Zeitalter der Elektronik: Elektronische Bauelemente wurden immer komplexer und kleiner, aber diese Prozesse stoßen nun an Grenzen. Die Spintronik verspricht, mit deutlich weniger Energieeinsatz Informationen allein auf der Grundlage von Spins zu speichern oder zu transportieren. Allerdings ist es immer noch eine Herausforderung, Spins durch externe Felder zuverlässig und in großem Maßstab zu steuern.

Die Übergangsmetall-Dichalcogenide (TMD) sind neben Graphen die am intensivsten untersuchten quasi-zweidimensionalen Materialien, die Ladungsdichtewellen, Supraleitfähigkeit und nichttriviale topologische Eigenschaften zeigen. Hafniumdiselenid (HfSe_2) gehört zu dieser Klasse von Materialien.

Von der Elektronik zur Spintronik

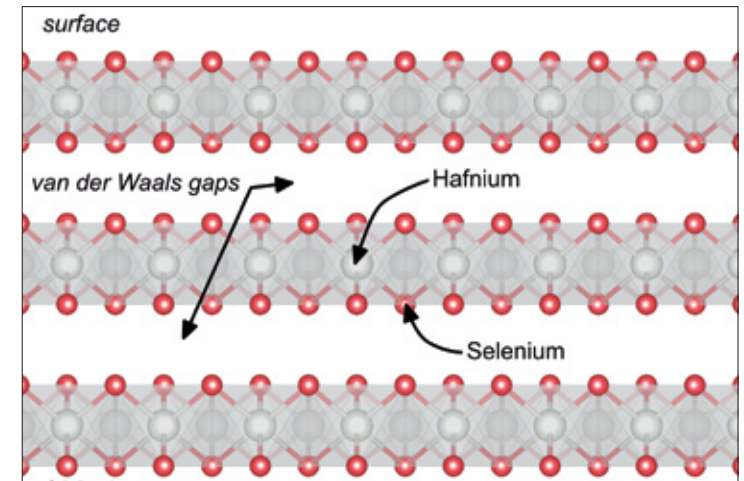
Ein Team an BESSY II hat die elektronische Struktur von HfSe_2 analysiert und eine neue Eigenschaft entdeckt, die die Erzeugung und Kontrolle von Spinströmen erleichtern könnte. „Um von der Elektronik zur Spintronik überzugehen, müssen wir Materialien finden, in denen sich Spin-up- und Spin-down-Elektronen unterschiedlich verhalten“, sagt Erstautor Oliver Clark. Es gibt zwei Möglichkeiten, dies zu erreichen: „Wir können entweder das Material von außen stören, so dass Elektronen mit unterschiedlichen Spins funktional ungleichwertig werden,

oder wir können Magnete verwenden, bei denen die Elektronen mit entgegengesetzten Spins von Haus aus funktional unterschiedlich sind.“

Bei der ersten Methode liegt die Schwierigkeit darin, geeignete Materialpaarungen und Mechanismen zu finden, mit denen die Spin-Kontrolle von außen aufgezwungen werden kann. Für die sogenannten 2H-strukturierten TMDs benötigt man beispielsweise perfekte Einkristalle und eine zirkular polarisierte Lichtquelle. Im Gegensatz dazu ist die zweite Methode viel einfacher, aber die Integration von Magneten in Bauelemente ist für den Betrieb herkömmlicher elektronischer Komponenten problematisch, vor allem in kleinem Maßstab.


Ein gangbarer Mittelweg

Zwischen diesen beiden Möglichkeiten gibt es jedoch einen Mittelweg, zumindest für einige ausgewählte Materialien wie HfSe_2 . „Wenn man dieses Material mit linear polarisiertem Licht untersucht, das einfacher zu erzeugen ist als zirkular polarisiertes Licht, verhält es sich in Bezug auf seine Spinstruktur wie ein Magnet“, erklärt Clark. „So wird die Spin-Selektivität sehr einfach, und man hat nicht die Probleme, die mit anderen magnetischen Eigenschaften verbunden sind.“ Der Vorteil dabei ist, dass weder die Kristallqualität noch die Ausrichtung der Probe noch eine Rolle spielen.



Hafniumdiselenid ist ein quasizweidimensionales Material mit interessanten Eigenschaften für die Spintronik. Die Zeichnung zeigt die Kristallstruktur.



O.Clark/HZB

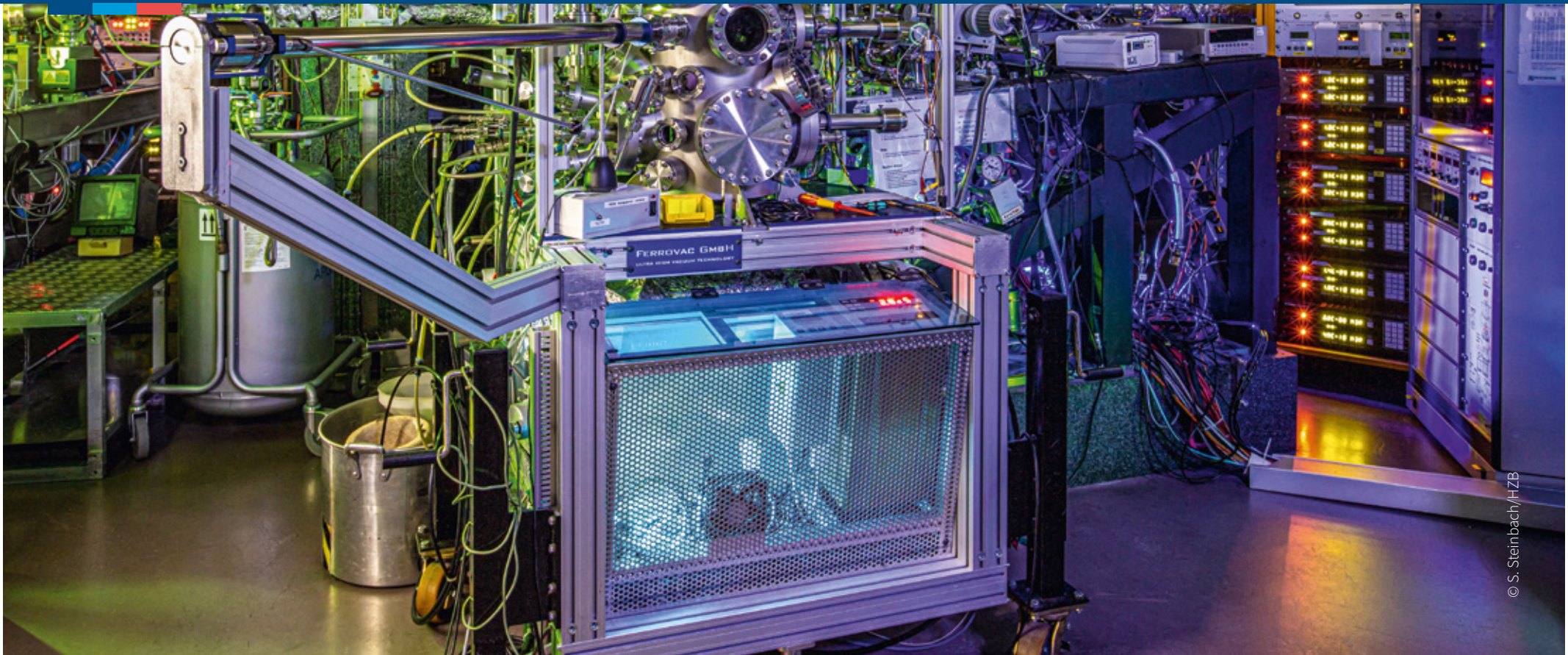
Dies eröffnet einen völlig neuen Weg zur Erzeugung von spinpolarisierten Strömen aus Übergangsmetall-Dichalcogeniden. „Unsere Ergebnisse sind nicht nur für Physikerinnen und Physiker von Bedeutung, die sich mit geschichteten zweidimensionalen Materialien beschäftigen, sondern auch für alle, die sich mit der Herstellung von spintronischen und opto-spintronischen Bauelementen beschäftigen“, sagt Clark. arö 

Nature Communications (2022): A hidden spin-orbital texture at the Γ -located valence band maximum of a transition metal dichalcogenide semiconductor. O. J. Clark, O. Dowinton, M. S. Bahramy and J. Sánchez-Barriga. DOI: 10.1038/s41467-022-31539-2



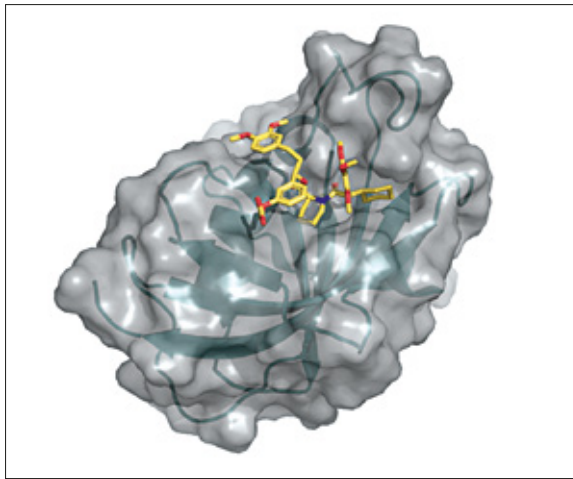
HIGHLIGHTS AUS DER FORSCHUNG – MATERIE

Um tiefe Einblicke in die Materie zu ermöglichen, wird die Röntgenquelle BESSY II mit ihren Instrumenten stetig weiterentwickelt. Die vielseitigen Messgeräte und der leistungsstarke Betrieb von BESSY II bilden die Grundlage für erstklassige Materialforschung am HZB und ziehen zahlreiche Forschungsgäste aus dem In- und Ausland nach Berlin – Arbeiten von Gastforschenden an BESSY II sind mit dem Symbol  gekennzeichnet. **Zu fast jeder Meldung gibt es eine wissenschaftliche Veröffentlichung. Klicken Sie dafür auf dieses Symbol:** 




4.000 PROTEINSTRUKTUR AN BESSY II ENTSCHLÜSSELT

Die MX-Beamlines der Röntgenquelle BESSY II sind auf die hochautomatisierte Strukturanalyse von Proteinkristallen spezialisiert. Sie ermöglichen dabei einen großen Durchsatz von Proben, weshalb 2022 bereits die 4000. Proteinstruktur entschlüsselt werden konnte. Die Nachfrage nach Messzeiten kommt dabei sowohl aus der Grundlagenforschung als auch von Nutzergruppen aus der Industrie.



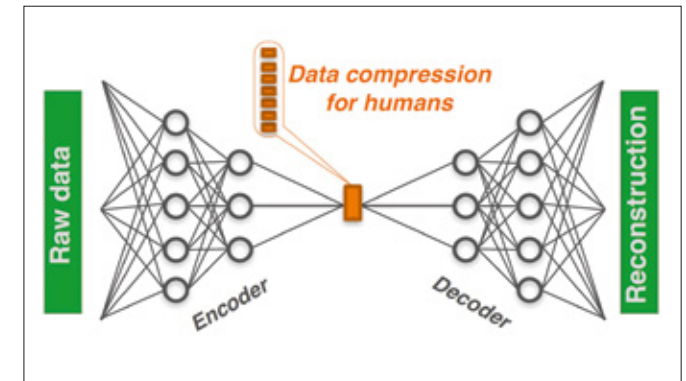
3D-Struktur des Proteins FKBP51, das als 4.000 Proteinstruktur an BESSY II untersucht wurde. © J. A. Lerma Romero

Für die 4.000 untersuchte Proteinstruktur hatte das Team um Felix Hausch von der Technischen Universität Darmstadt Kristalle aus dem Proteinmolekül FKBP51 hergestellt und an den MX-Beamlines untersucht. FKBP51 spielt bei großen Gesundheitsproblemen unserer Zeit eine besondere Rolle. Es reguliert die Signalweiterleitung von Steroidhormonrezeptoren. Durch Stress kann diese Weiterleitung gestört werden, was zu Depressionen, chronischen Schmerzen oder Krankheiten wie Diabetes und Fettleibigkeit führen kann. Das Protein FKBP51 gilt als vielversprechendes Ziel für Medikamente gegen diese Krankheiten. „Die Proteinstrukturanalyse zeigt uns, wo im Molekül interessante „Taschen“ liegen, die als Angriffspunkte für Medikamente in Frage kommen“, sagt Christian Meyners vom Team der TU Darmstadt. Das Ergebnis ist in der Protein Data Bank abgespeichert, die alle experimentell bestimmten Proteinstrukturen enthält. 


Front. Mol. Biosci. (2022): Binding pocket stabilization by high-throughput screening of yeast display libraries. J. A. Lerma Romero, C. Meyners, A. Christmann, L. M. Reinbold, A. Charalampidou, F. Hausch, H. Kolmar. DOI: 10.3389/fmolb.2022.1023131

KI-GESTÜTZTE SOFTWARE SCHAFFT DURCHBLICK BEI KOMPLEXEN DATEN

Experimentelle Daten sind oft nicht nur hochdimensional, sondern auch verrauscht und voller Artefakte. Das erschwert es, die Daten zu interpretieren. Nun kann eine am HZB entwickelte neue Software helfen, die auf Methoden der Künstlichen Intelligenz basiert: Es handelt sich um eine besondere Klasse von neuronalen Netzen (NN), die Fachleute mit dem Begriff „disentangled variational autoencoder network (β -VAE)“ bezeichnen. Vereinfacht gesagt sorgt das erste NN für die Komprimierung der Daten, während das zweite NN im Anschluss die Daten wieder rekonstruiert. „Dabei sind die beiden NN so trainiert, dass die komprimierte Form für den Menschen interpretierbar wird“, erklärt Gregor Hartmann, der am HZB das Joint Lab „Artificial Intelligence Methods for Experiment Design (AIM-ED)“ betreut, das gemeinsam mit der Universität Kassel betrieben wird.

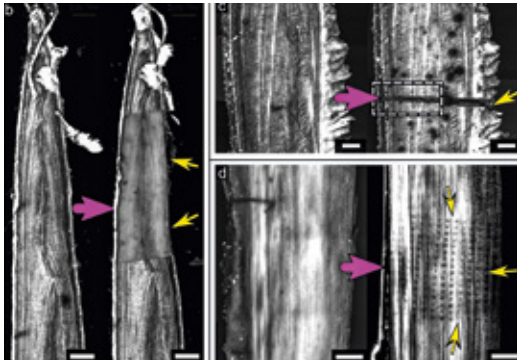


Mithilfe besonderer neuronaler Netzwerke können Rohdaten zuerst komprimiert und anschließend so rekonstruiert werden, dass sie für die Wissenschaft interpretierbar sind. © G. Hartmann et al.

Das ermöglicht Einblicke in Zusammenhänge, die sonst nicht erkennbar wären. Das Team um Hartmann hat die Software genutzt, um die Photonenenergie des Freien Elektronenlasers FLASH bei DESY aus Einzelphotoelektronenspektren zu bestimmen. Sie eignet sich jedoch für ganz unterschiedliche Anwendungen in der Wissenschaft. „Wir hoffen, dass bald viele Kolleginnen und Kollegen mit ihren Daten kommen und wir sie unterstützen können“, sagt Hartmann. 


Scientific Reports (2022): Unsupervised realworld knowledge extraction via disentangled variational autoencoders for photon diagnostics. G. Hartmann, G. Goetzke, S. Düsterer, P. Feuer-Forsen, F. Lever, D. Meier, F. Möller, L. Vera Ramirez, M. Guehr, K. Tiedtke, J. Viehhaus, and M. Braune. DOI: 10.1038/s41598-022-25249-4

ENERGIEREICHE RÖNTGENSTRAHLEN HINTERLASSEN SPUREN IM KNOCHENKOLLAGEN N



Die Bilder zeigen die Kollagenverteilung in Hechtknochen (b) vor (links) und nach (rechts) einem μ CT-Experiment, (c) sowie vor (links) und nach (rechts) einem Röntgenbeugungs- μ CT-Experiment an der mySpot-Beamline, BESSY. Außerdem (d) vor (links) und nach (rechts) einem 2D-Mapping-XRD mySpot-Experiment. Die geschädigten Bereiche erscheinen dunkel (mit gelben Pfeilen gekennzeichnet). Die Pfeile in Pink zeigen den Verlauf der Röntgenstrahlung. © Charité Berlin/HZB


Röntgenstrahlen schädigen ab einer bestimmten Dosis lebendes Gewebe, weshalb es in der Medizin klare Indikationen gibt, um die Strahlenbelastung auf ein unvermeidbares Minimum zu beschränken. In der Grundlagenforschung galt bislang das Gegenteil. „Mehr Fluss und höhere Energie ist besser, weil man mit intensiverer Röntgenstrahlung eine größere Tiefenschärfe und höhere Auflösung erreichen kann“, sagt Paul Zaslansky von der Charité-Universitätsmedizin, der mit seinem Team an BESSY II Knochenproben von Fischen und Säugetieren analysiert hat. BESSY II erzeugt ein breites Spektrum an Röntgenstrahlung, das Einblicke in feinste Strukturen sowie chemische und physikalische Prozesse in Materialien ermöglicht.

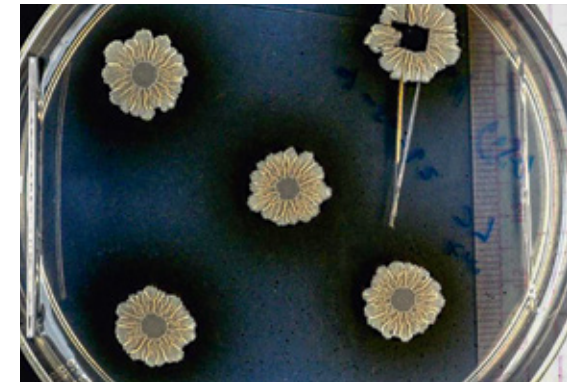
„Dank der empfindlichen Detektoren konnten wir an verschiedenen Knochenproben nachweisen, dass Kollagenfasern durch die Strahlungsabsorption in den mineralischen Nanokristallen geschädigt werden“, fasst Zaslansky die Ergebnisse der Studie zusammen. „Die hochenergetischen Photonen des Röntgenlichts lösen eine Kaskade von Elektronenanregungen aus. Die Ionisierung von Kalzium und Phosphor im Mineral schädigt dann Proteine wie Kollagen im Knochen“, erklärt Erstautorin Katrein Sauer. Wie in der Medizin kommt es also auch bei der Erforschung von Knochengewebe darauf an, eine minimale Dosis zu verwenden, um die gewünschten Erkenntnisse ohne eine Beschädigung der Probe zu erhalten. arö 

Nature communications (2022): Primary radiation damage in bone evolves via collagen destruction by photoelectrons and secondary emission self-absorption. K. Sauer, I. Zizak, J.-B. Forien, A. Rack, E. Scoppola, and P. Zaslansky. DOI: 10.1038/s41467-022-34247-z

WAS PASSIERT IN BIOFILMEN? N

Die meisten Bakterien haben die Fähigkeit, sich zu Gemeinschaften zusammenzuschließen. Sie bilden Biofilme, die auf den unterschiedlichsten Oberflächen haften und schwer zu entfernen sind. Dies kann in Krankenhäusern und bei Lebensmittelherstellern zu großen Problemen führen. Ein internationales Forscherteam hat unter anderem an BESSY II ein Modellsystem für Biofilme aus dem für Pflanzen nützlichen Bakterium *Bacillus subtilis* untersucht.

An der MySpot-Beamline konnte das Team die Strukturen innerhalb des Biofilms räumlich auflösen und gut zwischen Matrixkomponenten, Bakterienzellen, Sporen und Wasser unterscheiden. „Die Röntgenfluoreszenzspektroskopie ist eine Methode, mit der wir wichtige Metallionen wie Kalzium, Zink, Mangan und Eisen auch in Spuren nachweisen können“, erklärt HZB-Physiker Ivo Zizak, der die Beamline betreut. So konnte ein Zusammenhang zwischen der Morphologie des Biofilms und der Verteilung der Metallionen hergestellt werden. Die Ergebnisse zeigen, dass die Strukturen in der Matrix nicht nur eine wichtige Rolle bei der Verteilung von Nährstoffen und Wasser spielen, sondern auch aktiv die Fähigkeit des Bakteriums beeinflussen, sich als mehrzelliger Organismus zu verhalten. „Dies könnte uns helfen, insgesamt mit Biofilmen besser zurecht zu kommen, sowohl mit den nützlichen als auch mit den schädlichen“, sagt Liraz Chai von der Hebrew University. arö 




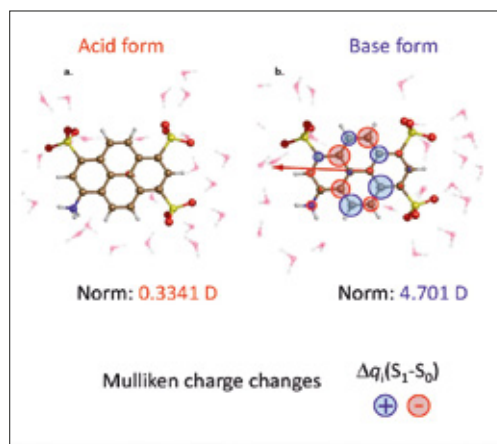
Wenn sich Bakterien zu Gemeinschaften zusammenschließen, können sie komplexe Strukturen bilden. Das Foto zeigt Biofilme aus dem Wildtyp *Bacillus subtilis*. © L. Chai/HUJI

PNAS (2022): Multiscale X-ray study of *Bacillus subtilis* biofilms reveals interlinked structural hierarchy and elemental heterogeneity. D. N. Azulay, O. Spaeker, M. Ghayeb, M. Wilsch-Bräuninger, E. Scoppola, M. Burghammer, I. Zizak, L. Bertinetti, Y. Politi, and L. Chai. DOI: 10.1073/pnas.2118107119

EIN ULTRASCHNELLER RÖNTGENBLICK IN DIE ELEKTRONISCHE STRUKTUR VON PHOTOSÄUREN N

Photosäuren sind Moleküle, die nach elektronischer Anregung ein Proton freisetzen und so den Säuregrad einer Flüssigkeit erhöhen. Die Pionierarbeit von Theodor Förster hat für solche Moleküle die direkte Beziehung zwischen der Wellenlänge der optischen Absorption und den Säureeigenschaften aufgezeigt, mit der die Erhöhung des Säuregrades im ersten elektronisch angeregten Zustand quantifiziert werden kann. Ein internationales Forscherteam hat mithilfe der ultraschnellen Röntgenspektroskopie die seit Langem offene Frage nach der Ursache für die Photoazidität klären können.

Das Team untersuchte an BESSY II die elektronischen Ladungsverteilungen von Photosäuren entlang ihrer vier Stadien. Das ermöglichte einen direkten mikroskopischen Einblick in die elektronischen Strukturänderungen der protonenspendenden Aminogruppe eines Aminopyren-Derivats in wässriger Lösung. Zusammen mit quantenchemischen Berechnungen ergaben diese Ergebnisse ein konsistentes Bild: Die Änderung der elektronischen Ladungsverteilungen der protonenspendenden Gruppe im angeregten Zustand fällt auf der konjugierten Photobasenseite erheblich stärker aus. Genauso wichtig ist jedoch die Änderung des Gesamtdipolmoments des gesamten Moleküls. Das macht die Solvatationsdynamik durch das Lösungsmittel Wasser zum zweiten wichtigen Faktor für die Bestimmung der Stärke einer Photosäure. MBI 



Simulierte Änderungen der Ladungsverteilung der APTS-Photosäure und der konjugierten Photobase, die in Änderungen der Mulliken-Ladungen und des elektrischen Dipolmoments bei elektronischer Anregung resultieren. © MBI

Angew. Chem. Int. Ed. (2022): Electronic Structure Changes of an Aromatic Amine Photoacid along the Förster Cycle. S. Eckert, M.-O. Winghart, C. Kleine, A. Banerjee, M. Ekimova, J. Ludwig, J. Harich, M. Fondell, R. Mitzner, E. Pines, N. Huse, P. Wernet, M. Odellius, and E. T. J. Nibbering. DOI: [10.1002/anie.202200709](https://doi.org/10.1002/anie.202200709)

MAGNETISCHE NANOPARTIKEL IN BIOLOGISCHEN TRÄGERN ERSTMALS EINZELN CHARAKTERISIERT N

Magnetische Nanopartikel sind vielversprechende Werkzeuge für medizinische Anwendungen. Eingebaut in biologische Vehikel, lassen sich diese dann durch externe Magnetfelder an ihren Einsatzort im Körper steuern, wo sie Medikamente freisetzen oder Krebszellen zerstören können. Dazu ist jedoch die genaue Kenntnis der magnetischen Eigenschaften dieser Nanoteilchen nötig. Bisher konnten solche Informationen nur gemittelt über tausende Nanopartikel gewonnen werden. Nun hat ein Team am HZB eine neue Methode entwickelt, um die charakteristischen Parameter jedes einzelnen magnetischen Nanopartikels zu bestimmen.

Dafür kombinierten die Forschenden Aufnahmen am Raster-Transmissions-Röntgenmikroskop MAXYMUS bei BESSY II mit theoretischen Simulationen. Dies ermöglichte es, die magnetische Anisotropie von Nanopartikeln im Inneren eines Bakteriums exakt zu bestimmen. Die magnetische Anisotropie ist ein wichtiger Parameter für die Kontrolle und Steuerung von magnetischen Nanopartikeln, da sie beschreibt, wie ein magnetisches Nanopartikel auf externe Magnetfelder reagiert. Aktuell sind solche Aufnahmen nur an Großforschungsanlagen wie BESSY II möglich, die ausreichend intensive Röntgenstrahlung liefern. „In Zukunft könnte diese Methode jedoch mit der Entwicklung kompakter Plasma-Röntgenquellen zu einer Standard-Labortechnik werden“, sagt Sergio Valencia.



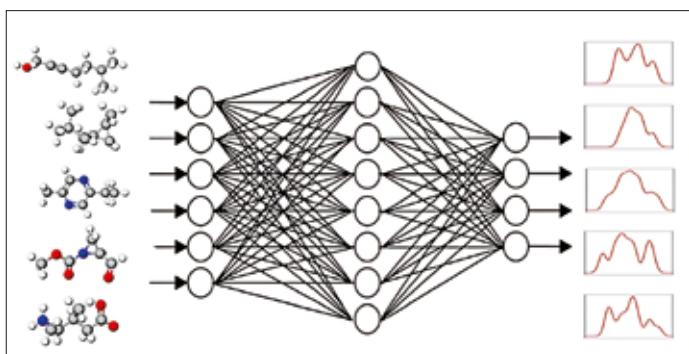
Unter dem Transmissionselektronenmikroskop ist die Bakterienzelle sichtbar, in der sich mehrere magnetische Nanopartikel zu einer Kette angeordnet haben. Die Skala zeigt 500 Nanometer. © L. Marcano/HZB

arö 

ACS Nano (2022): Magnetic Anisotropy of Individual Nanomagnets Embedded in Biological Systems Determined by Axi-asymmetric X-ray Transmission Microscopy. L. Marcano, I. Orue, D. Gandia, L. Gandarias, M. Weigand, R. M. Abrudan, A. García-Prieto, A. García-Arribas, A. Muela, M. Luisa Fdez-Gubieda, and S. Valencia. DOI: [10.1021/acsnano.1c09559](https://doi.org/10.1021/acsnano.1c09559)

MIT KÜNSTLICHER INTELLIGENZ DIE „FINGERABDRÜCKE“ VON MOLEKÜLEN ERRECHNEN

Biomoleküle, große anorganische Moleküle, aber auch Quantenpunkte, die oft aus tausenden von Atomen bestehen, sind mit konventionellen Methoden kaum noch vorab zu berechnen. Dies ist aber eine Voraussetzung, um experimentell gewonnene Messdaten korrekt zu interpretieren. Annika Bande, theoretische Chemikerin am HZB, hat mit ihrem Team systematisch untersucht, wie sich die Rechenzeit durch den Einsatz von Methoden aus der künstlichen Intelligenz verkürzen lässt. Dafür erhielt ein Computerprogramm aus



Das Graphische Neuronale Netz (GNN) erhält als Input kleine Moleküle mit der Aufgabe, deren spektrale Antworten zu ermitteln. Durch Abgleich mit den bekannten Spektren lernt das GNN-Programm, Spektren zuverlässig zu berechnen.

© K. Singh, A. Bande/HZB

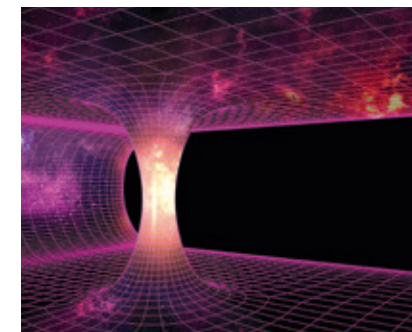
der Gruppe der „graphischen neuronalen Netze“ oder GNN als Input kleine Moleküle mit der Aufgabe, deren spektrale Antworten zu ermitteln. Im nächsten Schritt verglich das GNN-Programm die errechneten Spektren mit den bekannten Zielspektren (DFT oder experimentell) und korrigierte in der folgenden Runde den Berechnungsweg entsprechend. Runde für Runde wird so das Ergebnis immer besser. Das GNN-Programm lernt also selbstständig mit Hilfe bekannter Spektren, wie sich Spektren zuverlässig berechnen lassen. „Die Genauigkeit steigt um 20 Prozent und dies in einem Bruchteil der Rechenzeit“, sagt Kanishka Singh, Erstautor der Studie. „Kürzlich entwickelte GNN-Frameworks könnten sogar noch besser abschneiden“, erläutert Bande. „Und die Nachfrage ist sehr groß. Wir wollen diese Forschungsrichtung daher vertiefen.“

arö →

J. Chem. Theory Comput. (2022): Graph Neural Networks for Learning Molecular Excitation Spectra. K. Singh, J. Münchmeyer, L. Weber, U. Leser and A. Bande. DOI: 10.1021/acs.jctc.2c00255

WIE QUANTENKOMPLEXITÄT WÄCHST

Zwischen Quantenphysik und Gravitationstheorie klafft ein Graben. Nur wer ihn überbrückt, kann das Verhalten von komplexen Quanten-Vielkörpersystemen beschreiben, zum Beispiel das von Schwarzen Löchern und Wurmlöchern im Universum. Nun hat eine internationale Theoriegruppe eine mathematische Vermutung über das Verhalten von Komplexität in solchen Systemen bewiesen, und damit eine solche Brücke konstruiert. Die Quantenkomplexität wächst demnach linear für exponentiell lange Zeiten, bis sie zu einem Zeitpunkt gesättigt ist, der exponentiell zur Systemgröße ist.



Komplexe Systeme wie Wurmlöcher im Universum erfordern ein tieferes Verständnis von Raum, Zeit, Gravitation und Quantenphysik.

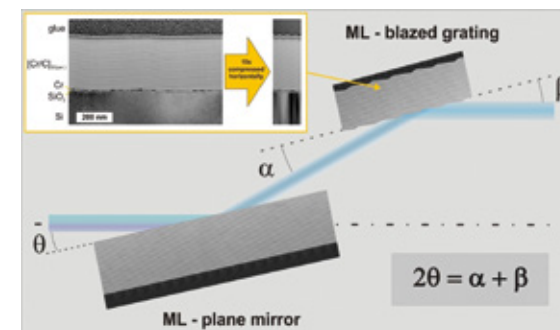
©Trahko/stock.adobe.com

Nature Physics (2022): Linear growth of quantum circuit complexity. J. Haferkamp, P. Faist, N. B. T. Kothakonda, J. Eisert and N. Yunger Halpern. DOI: 10.1038/s41567-022-01539-6

MONOCHROMATOROPTIKEN FÜR DEN „TENDER“ RÖNTGENBEREICH

Messungen mit hoher Empfindlichkeit und hoher Ortsauflösung mittels Röntgenlicht im „tender“ Energiebereich von 1,5 bis 5,0 keV sind ideal, um Energiematerialien für Batterien oder Katalysatoren, aber auch biologische Systeme zu untersuchen. Ein Team aus dem HZB macht dies mit neu entwickelten Monochromatoroptiken jetzt möglich.

arö →



Mithilfe eines neuen Monochromatorkonzepts können Nanostrukturen noch präziser vermessen werden.

© HZB

Small Methods (2022): Spectromicroscopy of nanoscale materials in the tender X-ray regime enabled by a high efficient multilayer-based grating monochromator. S. Werner, P. Guttmann, F. Siewert, A. Sokolov, M. Mast, Q. Huang, Y. Feng, T. Li, F. Senf, R. Follath, Z. Liao, K. Kutukova, J. Zhang, X. Feng, Z.-S. Wang, E. Zschech, G. Schneider. DOI: 10.1002/smt.202201382

TAUTOMERE GEMISCHE ENTRÄTSELT

Viele (organische) Moleküle liegen als Gemisch zweier fast identischer Moleküle vor, die die gleiche Summenformel haben, sich aber in einem wichtigen Punkt unterscheiden: Ein einzelnes Wasserstoffatom sitzt an einer anderen Position. In diesen sogenannten tautomeren Gemischen gehen die beiden isomeren Formen durch die Wanderung einzelner Atome oder Atomgruppen schnell ineinander über und bilden ein dynamisches und empfindliches chemisches Gleichgewicht. In ihrem Mengenverhältnis sind die Tautomere untereinander konstant.

Tautomere Gemische spielen in der Biologie eine große Rolle: So sind zum Beispiel viele Aminosäuren tautomere Gemische. Als Bausteine von Proteinen können sie deren Form und Funktion und damit auch ihre biologischen Funktionen in Organismen beeinflussen.

Aufgrund des dynamischen Gleichgewichts ist es jedoch fast unmöglich, die einzelnen Tautomere zu isolieren und ihre Eigenschaften zu bestimmen. Die elektronische Struktur solcher tautomeren Gemische gezielt experimentell voneinander zu trennen war bislang ebenfalls nicht möglich. Klassische spektroskopische Methoden erfassen nur die Summe der Signale der einzelnen Molekülformen, können aber nicht die Eigenschaften der beiden einzelnen Tautomere im Detail voneinander unterscheiden.

Durchbruch mit RIXS an BESSY II

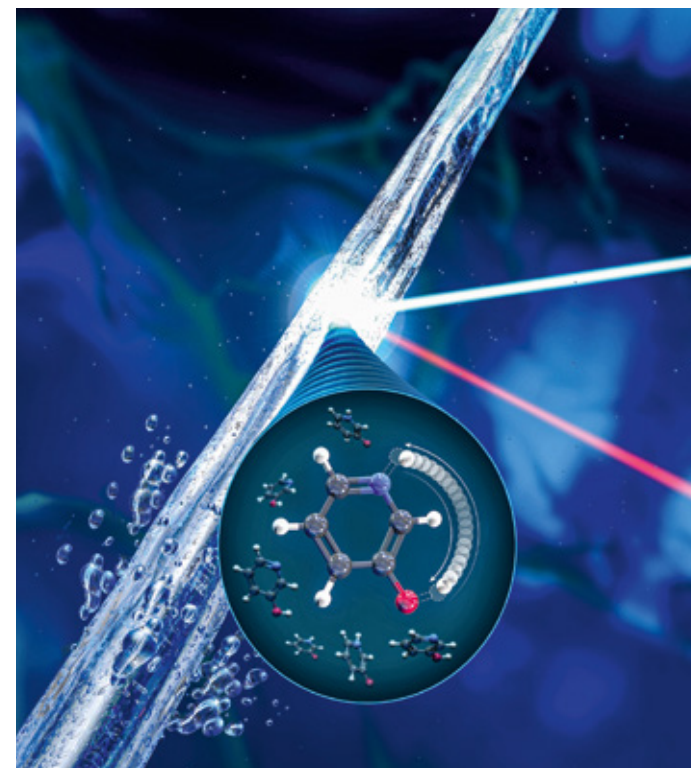
Einem Team um den HZB-Physiker Alexander Föhlisch ist es gelungen, eine Methode bereitzustellen, die genau das ermöglicht: Mit Hilfe der inelastischen Röntgenstreuung (RIXS) und einem neuen Konzept zur Auswertung der Daten lassen sich die einzelnen Anteile der Tautomere aus den Messdaten eindeutig voneinander unterscheiden.

„Wir können das Signal jedes einzelnen Moleküls in der Mischung experimentell trennen. Dies erlaubt uns einen detaillierten Einblick in ihre Funktionalität und chemischen Eigenschaften“, sagt Vinicius Vaz Da Cruz, Erstautor der Arbeit. „Wir messen ein reines Spektrum jedes Tautomers und nutzen dabei die Elementspezifität und Ortsselektivität der Methode“, erklärt Vaz Da Cruz. Dadurch lassen sich die Komponenten des tautomeren Gemischs vollständig charakterisieren.

Einblicke in biologische Prozesse


In der vorliegenden Studie wurde die Technik auf das prototypische Keto-Enol-Gleichgewicht von 3-Hydroxypyridin in wässriger Lösung angewendet. Die Daten wurden an der EDAX-Terminalstation bei BESSY II gewonnen.

Diese Ergebnisse liefern experimentelle Beweise für Konzepte, die in der Literatur bisher nur theoretisch



Das Bild illustriert die experimentelle Methode, mit der hier beispielhaft das Keto-Enol-Gleichgewicht untersucht wurde.

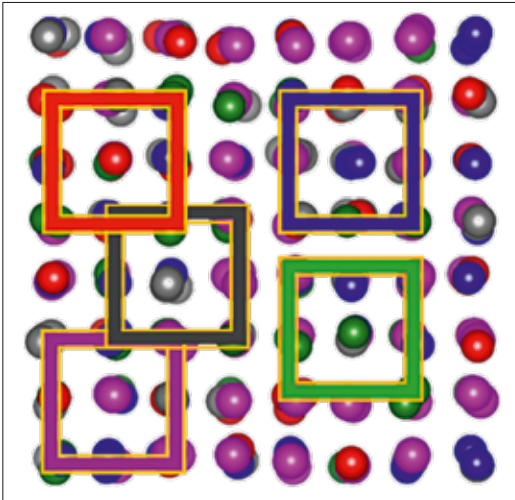
© M. Künsting/HZB

diskutiert wurden. Sie sind besonders interessant, um wichtige biologische Prozesse wie die Wechselwirkung zwischen Nukleobasen der DNA, die metabolische Umwandlung von Fruktose in Glukose oder die Faltung von Proteinen aufzuklären und zu verstehen. arö 

The Journal of Physical Chemistry Letters (2022): Targeting Individual Tautomers in Equilibrium by Resonant Inelastic X-ray Scattering. V. Vaz da Cruz, R. Büchner, M. Fondell, A. Pietzsch, S. Eckert, and A. Föhlisch. DOI: [10.1021/acs.jpcllett.1c03453](https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.1c03453)

STRUKTURELLE UNORDNUNG UND MAGNETISCHE EIGENSCHAFTEN IN HOCHENTROPEN LEGIERUNGEN

Hochentropie-Legierungen bestehen aus mindestens fünf verschiedenen metallischen Elementen. Sie sind aufgrund ihrer Hitze- und Strahlungsbeständigkeit eine äußerst interessante Klasse von Werkstoffen, etwa für Beschichtungen in Reaktoren oder in der Luftfahrt. Da ihre makroskopischen Eigenschaften stark von interatomaren Wechselwirkungen abhängen, ist es äußerst interessant, die lokale Struktur und strukturelle



Die untersuchte Cantor-Legierung besteht aus Chrom (grau), Mangan (rosa), Eisen (rot), Kobalt (blau) und Nickel (grün). Röntgenmethoden ermöglichen es, jede einzelne Komponente elementspezifisch zu untersuchen.

© A. Kuzmin/University of Latvia, A. Smekhova/HZB

„Indem wir das Verhalten einzelner Komponenten auf atomarer Ebene untersuchen, gewinnen wir wertvolle Hinweise für die weitere Entwicklung neuer komplexer Systeme mit der gewünschten Multifunktionalität“, sagt Smekhova. arö ➔

Nano Research (2022): Local structure and magnetic properties of a nanocrystalline Mn-rich Cantor alloy thin film down to the atomic scale. A. Smekhova, A. Kuzmin, K. Siemsmeyer, C. Luo, J. Taylor, S. Thakur, F. Radu, E. Weschke, A. Guilherme Buzanich, B. Xiao, A. Savan, K. V. Yuzenko, and A. Ludwig. **10.1007/s12274-022-5135-3**

Unordnung um jedes einzelne Element herum mit elementspezifischen Techniken zu untersuchen. Ein internationales Team um HZB-Physikerin Alevtina Smekhova hat an BESSY II eine sogenannte Cantor-Legierung untersucht – ein Modellsystem für die Hochentropieeffekte auf der lokalen und makroskopischen Skala.

Dafür nutzte das Team die Mehrkanten-Röntgenabsorptionsspektroskopie (EXAFS) sowie die Technik des röntgenmagnetischen Zirkulardichroismus (XMCD). Mit konventioneller Magnetometrie wurden magnetische Phasenübergänge nachgewiesen sowie Anzeichen für eine komplexe magnetische Ordnung entdeckt, in der verschiedene magnetische Phasen koexistieren.

POTENTIALFLÄCHEN VON WASSER ERSTMALS KARTIERT

Flüssigkeiten sind schwerer zu beschreiben als Gase oder kristalline Feststoffe. Ein HZB-Team hat nun an der Swiss Light Source SLS des Paul Scherrer Instituts, Schweiz, erstmals die Potentialflächen von Wassermolekülen in flüssigem Wasser unter normalen Umgebungsbedingungen kartiert. Das trägt dazu bei, die Chemie des Wassers und in wässrigen Lösungen besser zu verstehen. Diese Untersuchungen werden bereits an der neu errichteten METRIXS-Station an der Röntgenquelle BESSY II fortgesetzt. arö ➔

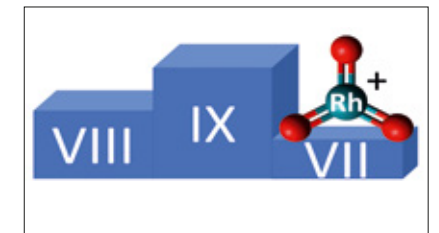


Untersuchungen an der METRIXS-Station helfen, die Chemie des Wassers zu verstehen. © unsplash

PNAS (2022): Cuts through the manifold of molecular H₂O potential energy surfaces in liquid water at ambient conditions. A. Pietzsch, J. Niskanen, V. Vaz da Cruz, R. Büchner, S. Eckert, M. Fondell, R. M. Jay, X. Lu, D. McNally, T. Schmitt, A. Föhlisch. **DOI: 10.1073/pnas.2118101119**

HÖCHSTE OXIDATIONSSTUFE VON RHODIUM ENTDECKT

Oxidationsstufen von Übergangsmetallen beschreiben, wie viele Elektronen eines Elements bereits an Bindungen beteiligt sind und wie viele noch für weitere Reaktionen zur Verfügung stehen. Teams aus Berlin und Freiburg haben nun die höchste Oxidationsstufe von Rhodium entdeckt. Dies deutet darauf hin, dass Rhodium mehr Valenzelektronen in chemische Bindungen einbringen kann, als bisher angenommen. Diese Erkenntnis könnte für das Verständnis von katalytischen Reaktionen mit Beteiligung von Rhodium von Bedeutung sein. red. ➔



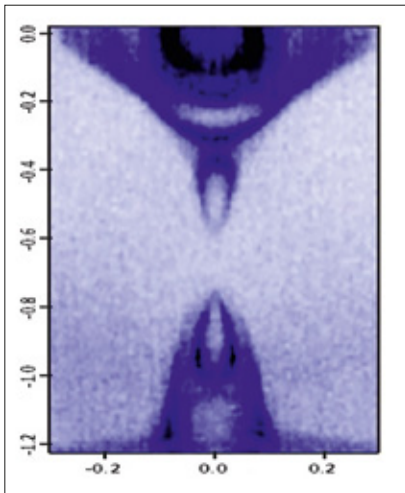
Seine neu entdeckte Oxidationsstufe macht Rhodium hinter Technetium und Ruthenium zum chemischen Element mit der dritthöchsten Oxidationsstufe überhaupt.

© M. da Silva Santos et al.

Angew. Chem. Int. Ed. (2022): The highest oxidation state of rhodium: rhodium(VII) in [RhO₃]⁺. M. da Silva Santos, T. Stüker, M. Flach, O. S. Ablyasova, M. Timm, B. von Issendorff, K. Hirsch, V. Zamudio-Bayer, S. Riedel, J. T. Lau. **DOI: 10.1002/anie.202207688**

NEUER MAGNETISCHER SPLITTINGEFFEKT AN BESSY II ENTDECKT

Neodym-Bismut-Kristalle gehören zur breiten Palette von Materialien mit interessanten magnetischen Eigenschaften. Die sogenannte Fermi-Fläche enthält dabei Informationen über die Transporteigenschaften der Ladungsträger im Kristall. Während die Fermi-Fläche normalerweise aus geschlossenen Konturen besteht, sind unzusammenhängende Abschnitte, die als Fermi-Bögen bezeichnet werden, sehr selten und können Anzeichen für ungewöhnliche elektronische Zustände sein.



Die Messung an der U125-2PGM-Undulator Beamline von BESSY II zeigt Bänder mit entgegengesetzter Krümmung, sogenannte Fermi-Bögen. © HZB

Ein internationales Forschungsteam hat nun experimentelle Beweise für solche Fermi-Bögen präsentiert. Sie beobachteten eine ungewöhnliche magnetische Aufspaltung im antiferromagnetischen Zustand der Proben unterhalb einer Temperatur von 24 Kelvin (der Néel-Temperatur): Sie erzeugt Bänder mit entgegengesetzter Krümmung, die sich mit der Temperatur sowie der antiferromagnetischen Ordnung ändern. Diese Beobachtung ist sehr wichtig, weil sie sich von den bisher theoretisch betrachteten und experimentell beobachteten Fällen magnetischer Aufspaltungen fundamental unterscheidet. Bei den bisher bekannten Zeeman- und Rashba-Aufspaltungen bleibt die Krümmung der Bänder immer erhalten. Da beide Effekte für die Spintronik wichtig sind, könnten diese Erkenntnisse zu neuen Anwendungen führen, zumal

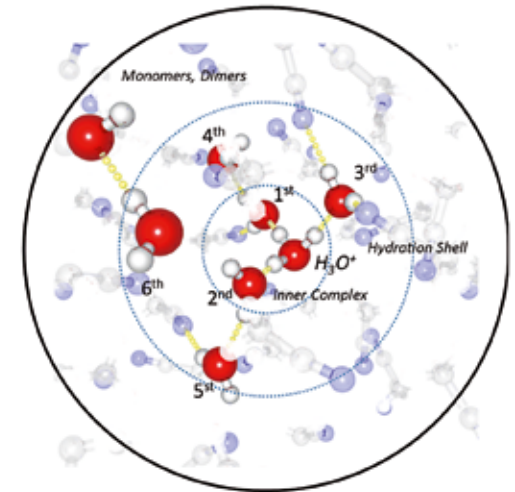
sich das Augenmerk bei der Spintronikforschung derzeit von traditionell ferromagnetischen hin zu antiferromagnetischen Materialien bewegt. arö →

Nature (2022): Emergence of Fermi arcs due to magnetic splitting in an antiferromagnet. B. Schruck, Y. Kushnirenko, B. Kuthanazhi, J. Ahn, L.-L. Wang, E. O'Leary, K. Lee, A. Eaton, A. Fedorov, R. Lou, V. Voroshnin, O. J. Clark, J. Sánchez-Barriga, S. L. Budko, R.-J. Slager, P. C. Canfield, and A. Kaminski. DOI: 10.1038/s41586-022-04412-x

ÜBER WELCHE DISTANZ KANN SICH EIN PROTON IN WASSER BEMERKBAR MACHEN?

Eine große Kooperation aus dem Max-Born-Institut, der Universität Hamburg, der Universität Stockholm, der Ben-Gurion-Universität und der Universität Uppsala hat neue Erkenntnisse über die elektronische Struktur hydratisierter Protonenkomplexe in Lösung gewonnen. Mit Hilfe der neuartigen Flatjet-Technologie führten sie an BESSY II röntgenspektroskopische Messungen durch und kombinierten sie mit Infrarotspektalanalyse und Berechnungen. Dadurch ließen sich zwei wesentliche Effekte unterscheiden: Lokale Orbital-Wechselwirkungen bestimmen die kovalente Bindung zwischen dem Proton und benachbarten Wassermolekülen, während Orbital-Energie-Verschiebungen die Stärke des ausgedehnten elektrischen Feldes des Protons messen.

Die Ergebnisse zeigen: Das Proton interagiert mit drei Wassermolekülen und bildet einen H_7O_3^+ -Komplex. Die Hydratschale dieses Komplexes wird durch das elektrische Feld der positiven Ladung des Protons beeinflusst. Diese Erkenntnisse haben direkte Auswirkungen auf das Verständnis der Protonenhydratation von Protonen in wässriger Lösung über Protonenkomplexe in Brennstoffzellen bis hin zur Wasserstruktur-Hydratationstaschen von Protonenkanälen in Transmembranproteinen. MBI/red. →

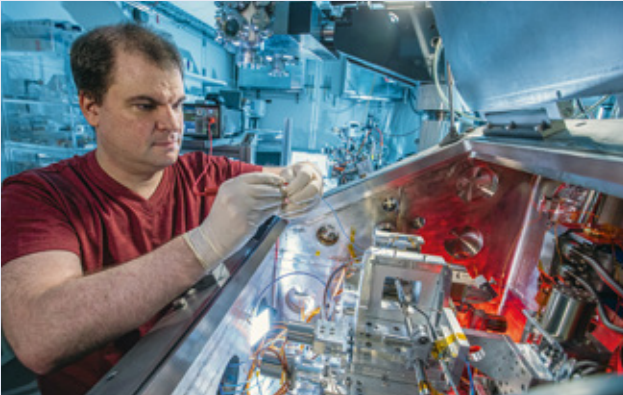


An BESSY II konnten die spektralen Fingerabdrücke von Wassermoleküle untersucht werden. Das Ergebnis: die elektronische Struktur der drei innersten Wassermoleküle in einem H_7O_3^+ -Komplex wird durch das Proton drastisch verändert. Darüber hinaus verändert sich auch die erste Hydrathülle aus fünf weiteren Wassermolekülen um diesen inneren Komplex, die das Proton über sein langreichweitiges elektrisches Feld wahrnimmt. © MBI

Angew. Chem. Int. Ed. (2022): From Local Covalent Bonding to Extended Electric Field Interactions in Proton Hydration. M. Ekimova, C. Kleine, J. Ludwig, M. Ochmann, T. E. G. Agrenius, E. Kozari, D. Pines, E. Pines, N. Huse, Ph. Wernet, M. Odellius and E. T. J. Nibbering. DOI: 10.1002/anie.202211066

ZAHLEN UND FAKTEN AUS DEM HZB

Stichtag: 31.12.2022



Klimaneutral: Das HZB strebt eine klimaneutrale Gesellschaft durch Wissenschaft und Innovation an. Deshalb treiben Forschende am HZB die Entdeckung von Energiematerialien an BESSY II voran und schaffen die Basis für neue nachhaltige Technologien. © Silvia Steinbach/HZB



International und interdisziplinär: Das an BESSY II erzeugte Synchrotronlicht ist für die Forschung einzigartig. Deshalb verzeichnet die Anlage jährlich etwa 2700 Besuche von Gastforschenden aus der ganzen Welt. Dabei treffen sich Forschende aus den unterschiedlichsten Disziplinen. © HZB

603

WoS-, SCOPUS oder Open Research Europe indexierte Publikationen haben Wissenschaftler*innen 2022 am HZB veröffentlicht.

24,6

Prozent Frauenanteil hatte das HZB beim 727 Mitarbeiter*innen umfassenden wissenschaftlichen Personal zum Jahresende 2022. Gemessen an der Gesamtzahl der 1.185 Beschäftigten lag der Frauenanteil bei 31,6 Prozent.

183

Doktorand*innen betreute das HZB im Jahr 2022. Dabei wurden 23 Dissertationen am HZB abgeschlossen.

79

Prozent betrug 2022 die HZB-externe Nutzung der Strahlzeit an BESSY II.

295

Tage wurde die Speicherringanlage BESSY II im Jahr 2022 (einschließlich Testbetrieb für die Wartung) insgesamt betrieben. An 188 Tagen stand sie den Nutzer*innen zur Verfügung. Nach dem Ende von pandemiebedingten Reise- und Arbeitsbeschränkungen sowie Sicherheitsauflagen in der Experimentierhalle BESSY II stieg die Auslastung, das heißt der Anteil der tatsächlich von Nutzer*innen im Rahmen der Verfügbarkeit für wissenschaftliche Experimente in Anspruch genommenen Zeit auf 96 Prozent.

240

Kooperationen, darunter 67 internationale, unterhielt das HZB Ende 2022 mit anderen wissenschaftlichen Einrichtungen – ein fast unveränderter Bestand gegenüber dem Vorjahr (247).

33

Jugendliche und junge Erwachsene befanden sich Ende 2022 am HZB in sieben verschiedenen Ausbildungsberufen und drei dualen Studiengängen. Der Frauenanteil bei den Auszubildenden betrug 36,4 Prozent.

26,87

Millionen Euro an Drittmittelträgen konnte das HZB 2022 verbuchen. Darin enthalten sind circa 3,21 Millionen Euro aus Auftragsforschung, 5,46 Millionen Euro aus Leistungen an Dritte, rund 8,92 Millionen Euro Projektförderung des Bundes und etwa 2,34 Millionen Euro von der Europäischen Union.

7

Nachwuchsgruppen forschten 2022 am HZB, vier weniger als im Jahr zuvor. Von diesen Nachwuchsgruppen sind sechs im Programmanteil „Methoden und Technologien für die Energiewende“ angesiedelt sowie eine dem Programmanteil „Quanten- und Funktionale Materialien“ zugeordnet.

87

Kooperationen ist das HZB allein im Jahr 2022 mit Unternehmen neu eingegangen. Damit ist die Gesamtzahl der laufenden Partnerschaften mit der Industrie von 205 im Vorjahr auf nun 194 leicht gesunken. Davon entfielen mehr als 18 Prozent auf Kooperationen mit internationalen Partnern und etwas mehr als 16 Prozent auf gemeinsame Projekte mit kleinen und mittleren Unternehmen.

2,78

Millionen Euro nahm das HZB 2022 aus dem Technologietransfer ein. Davon stammten 1,84 Millionen Euro aus Infrastrukturverträgen und 941.000 Euro aus Forschungs- und Entwicklungs-Kooperationen mit Wirtschaftsunternehmen aus dem In- und Ausland.

7

Patente wurden dem HZB 2022 erteilt. Der Patentbestand des HZB umfasste zum Jahresende 2022 156 Patente. 14 Patente sind Gegenstand laufender Lizenzverträge. Bei 13 Erfindungsmeldungen aus dem Jahr 2022 evaluieren das HZB und andere Technologieexperten derzeit, ob sie patentiert werden können und/oder wirtschaftlich verwertbar sind.

1.703

Schüler*innen experimentierten im Schülerlabor „Blick in die Materie“ im Jahr 2022. Das ist nach den Coronabedingten Einschränkungen ein deutlicher Anstieg gegenüber dem Vorjahr, als nur 466 Schüler*innen kommen konnten.

HZB unterzeichnet Charta der Vielfalt

Das HZB gehört seit Februar 2022 zu den Unterzeichnern der „Charta der Vielfalt“. Der Verein Charta der Vielfalt ist die größte Arbeitgebendeninitiative zur Förderung von Diversity in Unternehmen und Institutionen Deutschlands. Ziel der 2006 gegründeten Initiative ist ein vorurteilsfreies Arbeitsumfeld, in dem alle Beschäftigten – unabhängig von Alter,

ethnischer Herkunft und Nationalität, Geschlecht und geschlechtlicher Identität, körperlichen und geistigen Fähigkeiten, Religion und Weltanschauung, sexueller Orientierung und sozialer Herkunft – Wertschätzung erfahren.

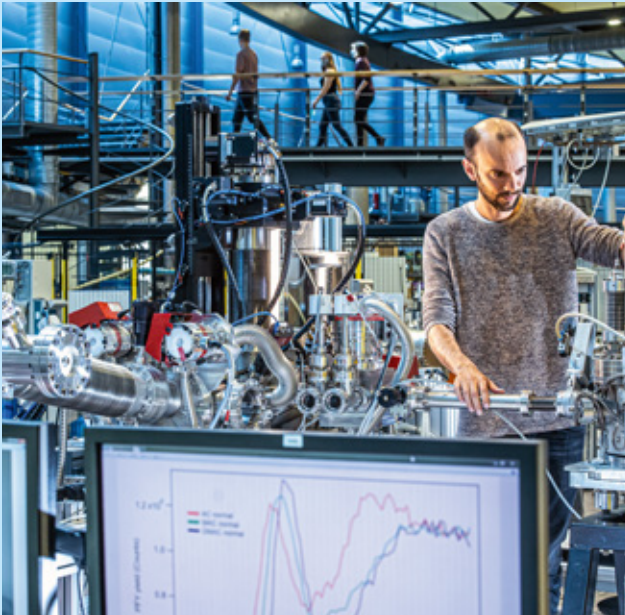
Mehr als 4.900 Organisationen haben die Charta der Vielfalt bis heute unterzeichnet. Damit repräsentiert die Charta der Vielfalt über 15 Millionen Beschäftigte. „Am Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie fördern wir die Diversität unserer Mitarbeitenden. Sie ist eine wichtige Voraussetzung für die Kreativität und Innovationskraft unseres Forschungszentrums. Vielfalt ist Teil unserer Arbeitskultur und bringt verschiedene Menschen zusammen“, sagt Thomas Frederking, kaufmännischer Geschäftsführer des HZB.



Mit der Unterzeichnung der Charta der Vielfalt setzt das HZB erneut ein Zeichen für Diversität. © M.Setzpfandt/HZB

40 Jahre Forschen mit Synchrotron-Licht in Berlin

Im September 1982 ging in Berlin-Wilmersdorf der erste Elektronenspeicherring unter dem Namen BESSY (Berliner Elektronenspeicherring-Gesellschaft für Synchrotronstrahlung) offiziell in Betrieb. Um das begehrte Synchrotron-



Seit 40 Jahren wird in Berlin mit Synchrotronstrahlung geforscht, seit 1998 an BESSY II. © S. Steinbach/HZB

Licht zu erzeugen, werden Elektronen auf nahezu Lichtgeschwindigkeit im Kreis beschleunigt. Dabei geben sie das besondere Licht ab, mit denen Wissenschaftler*innen ihre Proben durchleuchten. Auf diesem Prinzip basiert auch die Nachfolge-Anlage BESSY II, die 1998 in Berlin-Adlershof ih-

ren ersten Lichtstrahl erzeugte und vom HZB betrieben wird. Heute verzeichnet die Anlage jährlich zirka 2700 Besuche von Gastforschenden aus der ganzen Welt.

Seit dem ersten Strahl haben sich die Forschungsmöglichkeiten mit Synchrotron-Licht deutlich erweitert. Heute spielen Experimente, in denen Materialien für eine energieeffiziente Energieversorgung erforscht werden, die wichtigste Rolle. Der Betrieb des BESSY II-Beschleunigers ist hochkomplex. Damit Deutschland und die Welt weiterhin vom Synchrotron-Licht über das nächste Jahrzehnt hinaus profitieren, arbeiten die Beschleuniger-Spezialisten des HZB zusammen mit Partnern intensiv am Konzept für eine Nachfolge-Quelle BESSY III.

Kooperation für nachhaltiges Kerosin im Flugverkehr

Das HZB und das südafrikanische Industrieunternehmen Sasol leiten ein Konsortium, das Fischer-Tropsch-Katalysatoren der nächsten Generation entwickeln und optimieren will. Diese spielen eine Schlüsselrolle für die Produktion von nachhaltigem Kerosin im industriellen Maßstab und damit für eine langfristige Dekarbonisierung der Luftfahrt. Das internationale Forschungsprojekt CARE-O-SENE (Catalyst Research for Sustainable



Im CARE-O-SENE Projekt forschen sieben südafrikanische und deutsche Projektpartner an Fischer-Tropsch-Katalysatoren der nächsten Generation, um die Produktion von nachhaltigem Kerosin im industriellen Maßstab zu optimieren.

© care-o-sene.com

Kerosene) hat vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) Förderbescheide in Höhe von 30 Millionen Euro erhalten. Zusätzlich steuern die industriellen Konsortiumspartner 10 Millionen Euro bei.

Nachhaltiges Kerosin – sogenanntes Sustainable Aviation Fuel (SAF) – basiert nicht auf fossilen Rohstoffen wie herkömmliches Kerosin, sondern auf grünem Wasserstoff und Kohlendioxid. Die Technologie soll dazu beitragen, Sektoren wie die Luftfahrt zu dekarbonisieren, da fossile Energieträger in diesem Bereich besonders schwer zu ersetzen sind. Neben dem HZB und Sasol Germany sowie Sasol Limited tragen weitere Partner zum Gelingen des Projekts bei: Das Fraunhofer-Institut für Keramische Technologien und Systeme (IKTS), das Karlsruher Institut für Technologie (KIT), die Universität Kapstadt (UCT) und die INERATEC GmbH.

Berufungen, Auszeichnungen und Preise



Prof. Dr. Felix Büttner, der seit 2020 die Helmholtz-Nachwuchsgruppe MaXRay: Magnetismus und kohärente Röntgenmethoden leitet, hat zum 1. Juli 2022 den Ruf auf die W2-Professur für Physik mit der Ausrichtung auf kohärente Röntgenabbildungstechniken und Magnetismus an der Universität Augsburg angenommen.



Prof. Dr. Eva Unger wurde im Februar 2022 zur W2-Professorin an der Humboldt-Universität zu Berlin ernannt. Unger leitet am HZB ein großes Team und entwickelt aufskalierbare Technologien zur Herstellung von Perowskit-Halbleitern für preisgünstige und hoch-effiziente Solarzellen.



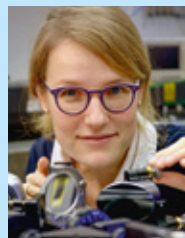
Prof. Dr. Steve Albrecht wurde im August 2022 auf eine S-W3-Professur an der Technischen Universität Berlin berufen. An der TU Berlin ist er Leiter des Fachgebiets „Perowskit Solarzellen“ an der Fakultät IV Elektrotechnik und Informatik. Durch gemeinsame Forschung soll die nächste Generation der hocheffizienten Tandemsolarzellen entwickelt werden.



Dr. Michelle Browne hat im Sommer 2022 am HZB mit dem Aufbau ihrer eigenen Nachwuchsgruppe begonnen. Sie konzentriert sich auf elektrolytisch aktive neuartige Materialsysteme und will zur Entwicklung von Elektrokatalysatoren der nächsten Generation beitragen, mit denen Wasserstoff effizient produziert werden kann.



Prof. Dr. Olga Kasian, seit Oktober 2021 S-W2-Professorin für „Materialien für die elektrochemische Energie-wandlung“ an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU), wurde am 20. Juni 2022 von der Werner-von-Siemens-Ring Stiftung in Anerkennung ihrer herausragenden wissenschaftlichen Leistungen in das Netzwerk der Stiftung aufgenommen.



Prof. Dr. Renske van der Veen (verheiratet Maaß), stand Ende 2022 kurz vor dem Abschluss des Berufungsverfahrens auf eine S-W2-Professur an der TU Berlin. Seit Anfang Februar 2023 vertritt sie dort im Rahmen einer gemeinsamen Professur mit dem HZB das Fachgebiet „Dynamics in Light Energy Conversion“ am Institut für Optik und Atomare Physik.

Royaler Besuch aus Schweden

Der schwedische König Carl XVI. Gustaf sowie eine Gruppe Unternehmenslenker großer Konzerne wie Ericsson, Nordholt, Vattenfall, ABB, Schneider Electric und schwedische Vertreter aus dem öffentlichen Sektor und der Wissenschaft besuchten am 11. Mai 2022 den Technologiepark Adlershof. In der Wissenschaftsstadt im Südosten Berlins befindet sich auch die vom HZB betriebene Synchrotronquelle BESSY II.

Die Delegation der Königlich Schwedischen Akademie der Technikwissenschaften, die auch vom schwedischen Botschafter in Berlin begleitet wurde, informierte sich bei ihrem Besuch des HZB über neuartige Photovoltaik-Technologien, die nächste Generation an Batterien sowie über katalytische Verfahren zur Gewinnung und Verarbeitung von grünem Wasserstoff. „Die Diskussion mit König Carl XVI. Gustaf und seinen hochrangigen Delegationsmitgliedern zu Fragen der Energieversorgung auf der Basis erneuerbarer Quellen war sehr inspirierend“, sagt Prof. Bernd Rech, wissenschaftlicher Geschäftsführer des HZB. „Wir freuen uns sehr über die vielen Anknüpfungspunkte für verstärkte Zusammenarbeit.“



Besuch der schwedischen Delegation (v.l.n.r.): Thomas Frederking, kaufmännischer Geschäftsführer HZB; Roland Sillmann, Geschäftsführer WISTA Management GmbH; König Carl XVI. Gustaf von Schweden; Per Thöresson, schwedischer Botschafter in Berlin; und Bernd Rech, wissenschaftlicher Geschäftsführer HZB.
© M. Setzpfandt/HZB

HZB/Wista Management

ERÖFFNUNG DER HELMHOLTZ-SESAME-BEAMLINE HESEB



Die Synchrotronstrahlungsquelle SESAME wurde 2017 in der Nähe von Amman eröffnet.

© SESAME

Seit Sommer 2018 erzeugt SESAME, der erste große Teilchenbeschleuniger im Nahen Osten, brillantes Synchrotronlicht. Das Akronym SESAME steht für Synchrotron-light and Experimental Science and Applications in the Middle East. Die Anlage befindet sich unweit der jordanischen Hauptstadt Amman. Gegründet wurde sie unter der Schirmherrschaft der UNESCO in Kooperation von Ägypten, Iran, Israel, Jordanien, Palästinensische Autonomiegebiete, Pakistan, Türkei und Zypern.

Am 12. Juni 2022 wurde dort die neue Helmholtz-SESAME-Beamline (HESEB) eingeweiht. Sie erzeugt weiche Röntgenstrahlung, die Forschung an einer Vielzahl wissenschaftlicher Fragestellungen insbesondere in der Festkörper-, Grenzflächen- und Oberflächenphysik ermöglicht. „SESAME zeigt schon seit vielen Jahren auf beeindruckende Weise, wie ein gemeinsames Forschungsprojekt Menschen aus verschiedenen Ländern des Nahen Ostens für die zivile Forschung zusammenbringen kann und ist ein echter Brückenbauer und ein Leuchtturm der Wissenschaftsdiplomatie“, sagte Otmar Wiestler, Präsident der Helmholtz-Gemeinschaft, bei der Einweihung. Die Helmholtz-Gemeinschaft hat das vierjährige Projekt HESEB mit 3,5 Millionen Euro finanziert. An dem Projekt sind neben dem HZB das Forschungszentrum Jülich, das Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, das Karlsruher Institut für Technologie und das DESY beteiligt.

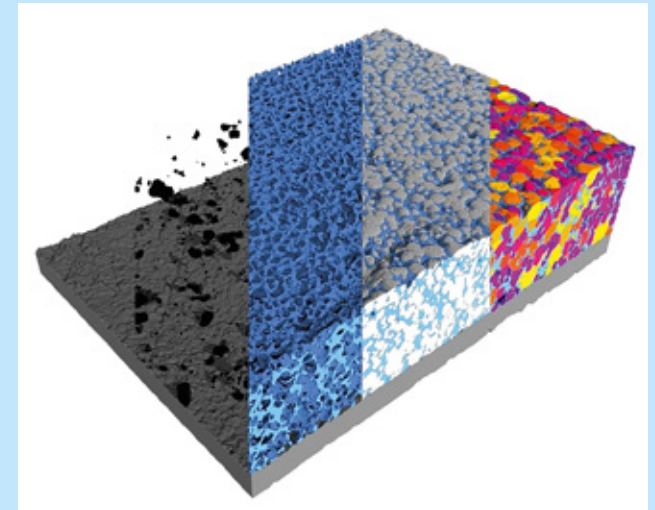
red.

TOMOGRAPHIE-LABOR FÜR DIE KI-UNTERSTÜTZTE BATTERIEFORSCHUNG

Röntgen-Tomographie ermöglicht es, direkt in eine Batterie hineinzuschauen und die Prozesse während des Entladens und Beladens zu beobachten. „Wenn etwa das Lithium zwischen Anode und Kathode hin und her wandert, dehnt sich möglicherweise das Lithium-Speichermaterial aus oder es finden chemische Umwandlungsprozesse statt“, erläutert der Tomographie-experte und Projektkoordinator Ingo Manke. Die dreidimensionale Abbildung dieser strukturellen Veränderungen kann Schwachstellen hinsichtlich Leistung und Haltbarkeit deutlich machen, zum Beispiel Alterungsprozesse.

Am HZB wird deshalb ein Labor für automatisierte Röntgen-Tomographie an Festkörper-Batterien eingerichtet. Das Besondere: Die 3D-Daten der Lade- und Entladeprozesse (operando) können anschließend mit Methoden der künstlichen Intelligenz rascher und vielseitiger ausgewertet werden. Das Bundesministerium für Bildung und Forschung fördert das Projekt „TomoFestBattLab“ mit 1,86 Millionen Euro. Die Kombination aus Methoden der künstlichen Intelligenz und Tomographie-Messverfahren ist ein innovativer Ansatz mit Pilotfunktion für die Ausstattung zukünftiger Labore. „Das Projekt hilft uns dabei, die Batterieforschung im Hinblick auf die Erfordernisse der Industrie 4.0 zu digitalisieren und neue Wege bei der Entwicklung von Batterien einzuschlagen“, sagt Manke.

arö



Röntgen-Tomographie einer Batterie-Kathode, virtuell in ihre Bestandteile zerlegt.

© M. Osenberg, I. Manke/HZB/Binder/KIT

LAGEPLAN



IMPRESSUM

HZB Highlights 2022 des Helmholtz-Zentrums Berlin für Materialien und Energie GmbH. Nachdruck nur mit ausdrücklicher Genehmigung des Herausgebers.
Redaktionsschluss: August 2023

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: redaktion@helmholtz-berlin.de

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

Wir halten Sie gerne monatlich auf dem Laufenden und dafür gibt es zwei Optionen. Der **HZB-Newsletter** informiert in deutscher Sprache über Forschung am HZB, Personalia und Termine. Die englischsprachigen **BESSY-News** richten sich verstärkt an Personen, die an der Forschung mit Synchrotronstrahlung interessiert sind, berichten aber auch das Allerwichtigste aus der gesamten HZB-Forschung.

Bitte melden Sie sich per Email mit Betreff:
HZB-Newsletter und/oder
BESSY-News bei redaktion@helmholtz-berlin.de.



KONTAKT

www.helmholtz-berlin.de