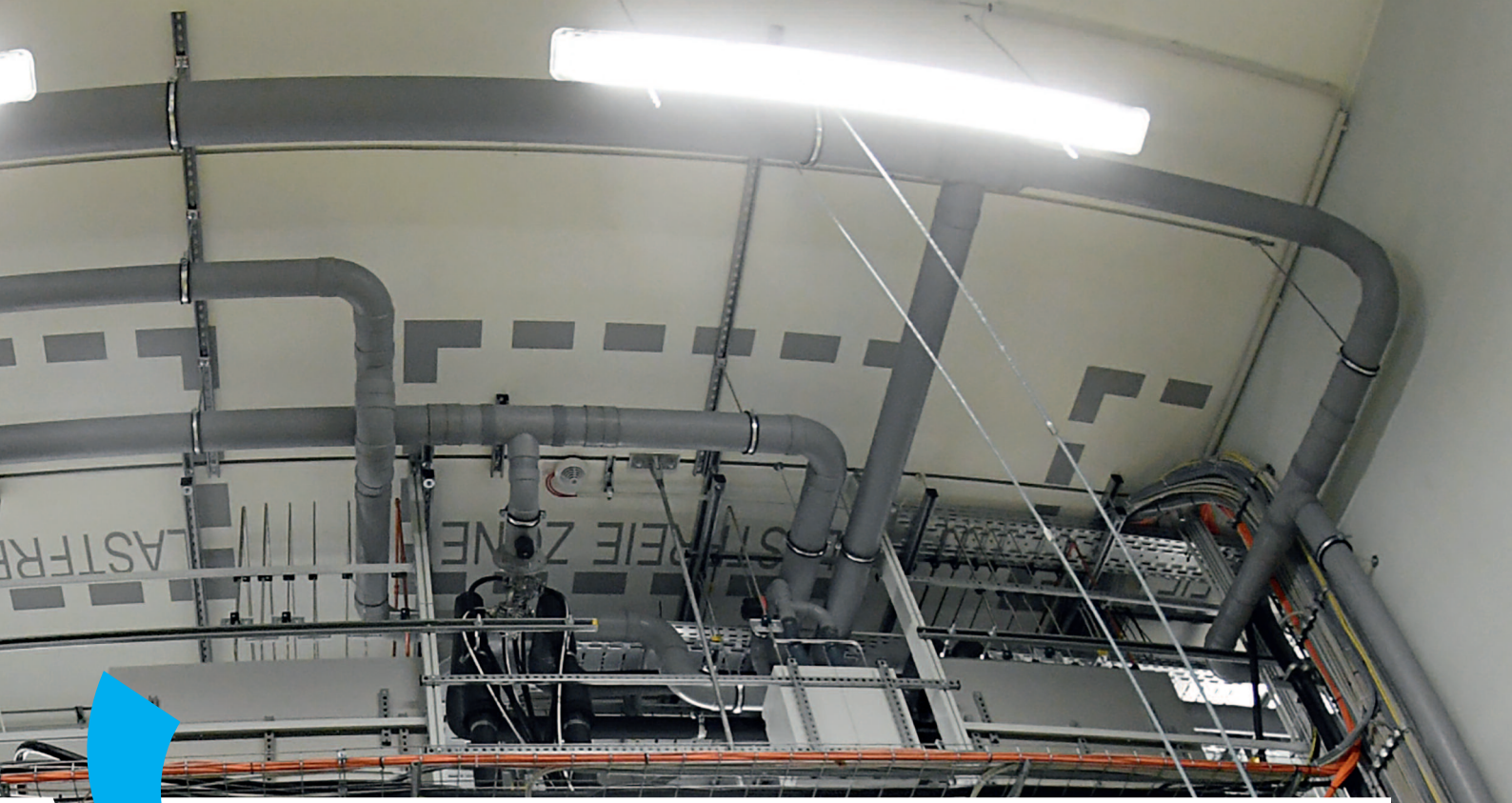


ENERGIE IST UNSERE MATERIE



HIGHLIGHTS 2018

Leistungsbericht mit Höhepunkten aus der Forschung am
Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie



INHALT

Vorwort

Interview: „Die Forschung mit Photonen und an Energiematerialien macht das HZB einzigartig“
Forschungsjubiläum 2018/2019:
10 Jahre HZB, 20 Jahre BESSY II

Energiematerial-Forschung

Einblick in die Verlustprozesse bei Perowskit-Solarzellen
Selbstorganisierte, molekulare Monolagen für effiziente Perowskit-Solarzellen
Neuer Weg für effizientere Silizium-Solarzellen
Weltrekord bei der direkten solaren Wasserspaltung
Mit Bleistift und Papier Wärme in Strom umwandeln
Maschinelles Lernen für bessere Photonik-Anwendungen
Nanodiamanten als günstige Photokatalysatoren
Leuchtende Nanoarchitekturen aus Galliumarsenid
Germanium verbessert Solarzellen aus Kesteriten
Graphen auf dem Weg zur Supraleitung
Blauer Phosphor – erstmals vermessen und kartiert

Methodenentwicklung für die Forschung an HZB-Großgeräten

03	Übergangsmetallkomplexe: Gemischt geht's besser	21
	Elektronische Prozesse bei der Katalyse beobachtet	22
04	Neutronen tasten Magnetfelder im Inneren von Proben ab	23
06		
08	Nutzerexperimente	24
	Ein Superkatalysator für die Elektrolyse	26
	Nanostrukturierung erhöht die Effizienz von Metall-freien Photokatalysatoren	27
09	Bakterien mit magnetisch empfindlichem Kompass	28
	Kleiner Tausch mit tödlicher Wirkung	29
	Zahlen und Fakten aus dem HZB	30
	Beschleunigerforschung und -weiterentwicklung	32
	Neuer Betriebsmodus an BESSY II erfolgreich getestet	33
	Meilenstein für bERLinPro: Photokathode mit hoher Quanteneffizienz	34
	Kavitäten aus supraleitendem Niob	35
	Vermischtes/Anhang	36
	Vermischtes	36
	Organigramm des HZB	38
	Lageplan, Impressum	39



HZB-JUBILÄEN: RÜCKBLICK UND ANSPORN

Zehn Jahre HZB – das sind zehn Jahre gemeinsame und erfolgreiche Forschung mit den beiden Großgeräten des HZB, der Synchrotronlichtquelle BESSY II und der Neutronenquelle BER II. Als neu berufene wissenschaftliche Geschäftsführer setzen wir beide, Jan Lüning und Bernd Rech, uns mit ganzer Kraft dafür ein, dass sich die Erfolgsgeschichte des Zentrums fortsetzt: Wie in der vergangenen Dekade möchte das HZB auch in Zukunft BESSY II weiterentwickeln sowie neue Materialien und Methoden erforschen, mit denen die Nutzung erneuerbarer Energien vorankommt.

Angesichts der großen Herausforderungen, die der Klimawandel für die Industrienationen als Hauptverursacher von CO₂-Emissionen darstellt, ist das Interesse der Bevölkerung an unserer Forschung groß. Das erleben wir jedes Jahr im Sommer bei der Langen Nacht der Wissenschaften: 2018 kamen 4.700 Gäste – so viele wie noch nie – um sich über unsere Forschung auf dem Campus Adlershof zu informieren.

Wir arbeiten an zukunftsweisenden Lösungen, zum Beispiel an neuartigen Perowskit-Solarzellen, Materialien für die künstliche Photosynthese, solar erzeugten Wasserstoff sowie Quantenmaterialien, die den Stromverbrauch von Computern reduzieren könnten.

2018 war die Lange Nacht der Wissenschaften nicht nur ein Publikumsmagnet für das HZB. Sie stellte zugleich den Auftakt für ein Jubiläums-Halbjahr dar, das bis 2019 andauerte. Zu feiern gab es zum einen das zehnjährige Bestehen des HZB nach der Fusion des Hahn-Meitner-Instituts (HMI) mit der Berliner Elektronenspeicherring-Gesellschaft für Synchrotronstrahlung (BESSY) im Jahr 2009 – und zum anderen 20 Jahre Forschung an BESSY II, das 1998 in Betrieb ging.

Im Rahmen des Jubiläums erlebten viele Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter im stimmungsvoll beleuchteten BESSY-



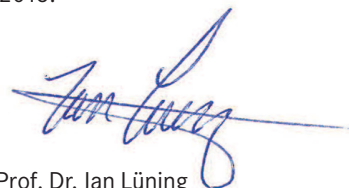
Prof. Dr. Bernd Rech
Wissenschaftlicher Geschäftsführer

Foyer, wie man mit Improvisationstheater humorvoll auf die eigene Geschichte blicken kann. Zahlreiche Gäste aus Wissenschaft und Politik sind im Februar 2019 unserer Einladung ins Tipi am Kanzleramt gefolgt, wo das Jubiläum einen Höhepunkt fand.

Das Jubiläum war ein großer Ansporn, sich für eine erfolgreiche Zukunft des HZB einzusetzen.

Gemeinsam mit den Mitarbeitenden am HZB wollen wir die Weichen dafür stellen. Schon jetzt danken wir allen, die uns auf diesem Weg begleiten, für ihre Unterstützung.

Ihnen, unseren Leserinnen und Lesern, wünschen wir nun eine informative Lektüre unseres HZB-Highlight-Berichts 2018.



Prof. Dr. Jan Lüning
Wissenschaftlicher Geschäftsführer



Die beiden wissenschaftlichen Geschäftsführer des HZB, Prof. Dr. Jan Lüning (links) und Prof. Dr. Bernd Rech.

IMMER AKTUELL INFORMIERT MIT DEM HZB-NEWSLETTER

Mit unserem Newsletter informieren wir Sie einmal im Monat über wissenschaftliche Highlights, Veranstaltungen und personelle Veränderungen im HZB. Die Anmeldung unter Einhaltung der datenschutzrechtlichen Bestimmungen geht schnell und einfach unter www.hz-b.de/newsletter.

„DIE FORSCHUNG MIT PHOTONEN UND AN ENERGIE-MATERIALIEN MACHT DAS HZB EINZIGARTIG“

Der Aufsichtsrat des HZB hat in seiner Sitzung am 21. November 2018 auf Vorschlag der Findungskommission **Prof. Dr. Bernd Rech** und **Prof. Dr. Jan Lüning** als wissenschaftliche Geschäftsführer des HZB bestellt. Damit stehen zwei international anerkannte Experten für Photonenforschung und Energieforschung an der Spitze des Zentrums.

Herr Lüning, was hat Sie an der neuen Aufgabe als wissenschaftlicher Geschäftsführer gereizt?

JL: Das HZB hat in der wissenschaftlichen Gemeinschaft einen hervorragenden Ruf. „Forschung mit Photonen“ und „Forschung an Energiematerialien“ sind zwei Standbeine, die inhaltlich wirklich ausgezeichnet zusammenpassen. Das ist unsere große Stärke, die das HZB einzigartig macht. Es ist eine sehr spannende Aufgabe, diese Standbeine und vor allem die Schnittstelle zwischen beiden weiterzuentwickeln und unsere Erfolge noch sichtbarer zu machen. Für mich bedeutet der Wechsel auch ein Zurückgeben: Während meiner wissenschaftlichen Arbeit habe ich immer davon profitiert, dass sich andere für sehr gute Forschungsmöglichkeiten an Großgeräten eingesetzt haben. Ich verstehe es nun als meine Aufgabe, die Forschung mit weicher Röntgenstrahlung am HZB weiterzuentwickeln und die bestmöglichen Bedingungen dafür zu schaffen.

„Es geht darum, die Synergien noch besser wissenschaftlich zu nutzen, die Energie- und Großgeräte-Forschung bieten.“

Wie haben Sie das Zentrum von außen wahrgenommen?

JL: Ich bin schon seit vielen Jahren Nutzer an BESSY II und kenne das HZB gut. Von außen sind vor allem die großen Erfolge in der Energieforschung sichtbar. Doch das HZB genießt auch mit BESSY II international einen ausgezeichneten Ruf. Es ist für seine hochauflösenden spektroskopischen Methoden bekannt, die für eine Vielzahl von Materialien – Feststoffe, Gase und Flüssigkeiten – zur Verfügung stehen. Mit der Entwicklung des „Femtosing“ und des „low-alpha-Modus“ haben die Mitarbeitenden visionäre Arbeit geleistet. Darüber hinaus werden an BESSY II äußerst spannende Projekte in der Beschleunigerphysik realisiert, die die Community mit großer Aufmerksamkeit verfolgt.

Herr Rech, Sie haben im Mai 2016 die kommissarische wissenschaftliche Geschäftsführung übernommen. Warum haben Sie sich entschieden, diese Aufgabe fortzuführen?

BR: Gleich nachdem ich kommissarischer wissenschaftlicher Geschäftsführer war, standen die Vorbereitungen auf die wissenschaftliche Begutachtung an. Trotz der Anstrengungen, das HZB durch die Programmorientierte Förderung zu führen, hat mir diese Aufgabe viel Spaß gemacht. Ich hatte dadurch das Glück, die Forschung an den Großgeräten viel stärker kennenzulernen. Und dabei gemerkt, dass es viel mehr gemeinsame Möglichkeiten gibt, als ich vorher selbst gedacht hatte. Das alles hat mich motiviert weiterzumachen. Es geht darum, die Synergien noch besser wissenschaftlich zu nutzen, die Energie- und Großgeräte-Forschung bieten.

Welche Chancen sehen Sie?

BR: Wir haben uns in den Themenfeldern „Energiematerialien“, „Materialien für die Informationstechnologien“ und „Forschung mit Photonen“ ein einzigartiges Profil erarbeitet. Dass wir diese Bereiche noch stärker zusammenbringen müssen, wurde auch in beiden Begutachtungen festgestellt. Das nehmen wir als gemeinsamen Auftrag mit. Und diese Aufgabe ist gut lösbar, denn es gibt viele Anknüpfungspunkte. Das Weichröntgen-Synchrotron BESSY II bietet mit seiner Energie- und Zeitauflösung einzigartige Möglichkeiten, um Materialien für eine klimafreundliche Energieversorgung zu erforschen. Das betrifft Materialien, die Sonnenlicht in Strom oder in solare Brennstoffe umwandeln, aber auch Materialien für Batterien. Neue Quantenmaterialien versprechen spannende Ansätze für die Energieeinsparung in der Informationstechnik. Das Synchrotron hilft uns, unter anderem den Transport von Ladungsträgern besser zu verstehen. Umgekehrt bietet es sich an, unsere ausgeklügelten Synthese- und Analysetechniken aus der Energieforschung in internationale Kooperationen einzubringen oder Nutzern zur Verfügung zu stellen.

Derzeit wird viel investiert: BESSY II wird um Möglichkeiten des zeitaufgelösten Messens erweitert. Was bringt das Upgrade?

JL: Dass man endlich auch mit dem Synchrotron schnelle Prozesse „filmen“ kann. Die Idee ist, dass Nutzer statisch gewonnene Erkenntnisse durch die Zeitauflösung erweitern können. BESSY VSR wird kurze Lichtpulse von 15 und 1,5 Pikosekunden liefern; dadurch können Forschungsteams zum Beispiel den Transport von Ladungen auf diesen Zeitskalen charakterisieren. Oftmals brauchen Forscher gar nicht die ultimativ kleinste Zeitauflösung wie bei Experimenten an Freie-Elektronen-Lasern. Aber Synchrotrons bieten die höchste Strahlstabilität und eine große Bandbreite an Messmethoden, deshalb ist es interessant, auch hier die kürzeren Zeitskalen zugänglich zu machen.

„Ein neues Großgerät ist der einzig sinnvolle Weg, um die Bedürfnisse der starken Nutzergemeinschaft zu erfüllen.“

Warum benötigt die Nutzergemeinschaft mittelfristig eine neue Quelle im weichen Röntgenbereich?

JL: Zurzeit steht bei den Synchrotrons ein Generationswechsel an: Die vierte Generation sind beugungslimitierte Speicherringe, die Strahlung einer ganz neuen Qualität erzeugen. Man kann diese Strahlen besser auf einen Punkt fokussieren und damit kleinere räumliche Einheiten charakterisieren. Dies bedeutet nicht nur eine höhere räumliche Auflösung, sondern auch einen riesigen Fortschritt für viele andere experimentelle Techniken. Dies wird zum Beispiel neue Einblicke in Quantenmaterialien oder in der Katalyse- und Energieforschung ermöglichen. Hinzu kommt, dass jedes Großgerät, auch BESSY II, einen natürlichen Lebenszyklus hat. Wir kommen langsam in die Phase, in der BESSY II nicht mehr das bieten kann, was heute und zukünftig technisch möglich ist. Deshalb ist ein neues Großgerät der einzig sinnvolle Weg, um die Bedürfnisse der starken Nutzergemeinschaft in Deutschland zu erfüllen. Unsere Aufgabe ist es nun, eindrücklich zu belegen, wie wichtig BESSY III für den Industrie- und Technologiestandort Deutschland ist. Der Rückenwind, den wir von unseren Partnern und Nutzern erhalten, ist sehr groß.

Welche Rolle wird der Standort Wannsee künftig spielen?

BR: Wir befinden uns in einer Übergangsphase, denn der Forschungsreaktor BER II, der ebenfalls exzellent begutachtet worden ist, läuft nur noch bis Ende 2019. Das ist eine große Herausforderung. Dennoch ist es uns wichtig, dass wir die Chancen betonen, die in diesem Wandel



Die beiden wissenschaftlichen Geschäftsführer des HZB: Prof. Dr. Jan Lüning (links) und Prof. Dr. Bernd Rech.

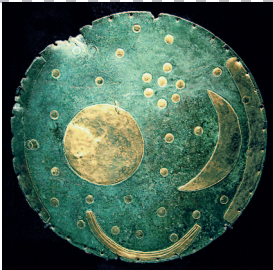
stecken. Der Campus Wannsee spielt heute sowohl bei den Quantenmaterialien als auch bei den solaren Brennstoffen eine sehr wichtige Rolle. Er bietet Forschenden eine breite Palette an Synthese- und Analytikmethoden. In den vergangenen Jahren hat das HZB viel in den Standort Wannsee investiert, es gibt neue Labore für die Entwicklung von solaren Brennstoffen, für funktionale Oxide und neue Laser-Labore für Kurzzeitspektroskopie. Die Campusentwicklung ist somit ein Teil der Gesamtstrategie für eine erfolgreiche Zukunft des HZB.

Das Gespräch führten Ina Helms und Silvia Zerbe.

ZUSAMMENGEFASST

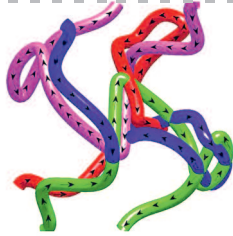
- „Forschung mit Photonen“ und „Forschung an Energiematerialien“ sind die beiden großen Standbeine und Stärken, die das HZB und seine Forschungsinfrastruktur einzigartig machen.
- Die Weiterentwicklung von BESSY II zum variablen Pulspeicherring BESSY VSR ist ein wichtiger Schritt auf dem Weg zu einem Speicherring der nächsten Generation. Mit BESSY VSR kann Strahlung einer ganz neuen Qualität erzeugt werden – damit verbessern sich auch die Möglichkeiten des zeitaufgelösten Messens.
- Im Bereich „Forschung an Energiematerialien“ arbeiten die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler des HZB an Solarzellen der nächsten und übernächsten Generation, an solaren Brennstoffen und an Quantenmaterialien für eine energieeffiziente Informationstechnologie. Damit leisten sie ihren Beitrag für die dringend notwendige Energiewende.

10 JAHRE HZB, 20 JAHRE BESSY II



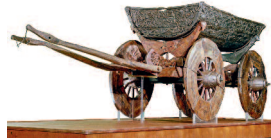
2003
Die Himmelsscheibe von Nebra

Die 1999 entdeckte Himmelsscheibe stammt aus der frühen Bronzezeit. Forscher nahmen sie an der BAM-Beamline von BESSY II unter die Lupe und stellten fest, dass das Gold nicht wie vermutet aus Rumänien, sondern aus Cornwall in England stammt. Dies erlaubt Rückschlüsse auf Handelswege vor 4000 Jahren.



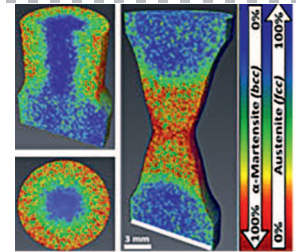
2009
Magnetische Monopole in magnetischem Festkörper entdeckt

Mit Neutronenstreuung haben Physiker am HZB nachgewiesen, dass sich unter sehr speziellen Bedingungen magnetische Monopole bilden können. Dabei sind Nord- und Südpol voneinander weit getrennt, was normalerweise niemals vorkommt. Die Existenz solcher magnetischen Monopole war durch die Quantenphysik vorausgesagt worden.



2012
Wikingerschatz vom Oseberg

Norwegische Restauratoren haben an BESSY II einen vom Zerfall bedrohten Holzwagen aus einem Wikingergrab in der Nähe des Oslo-Fjords untersucht. Er wurde damals mit Alaun konserviert, das die Fasern im Holz stark veränderte. Die Ergebnisse helfen, neue Techniken der Konservierung für Holz zu entwickeln, um den Kulturschatz zu retten.



2014
Was passiert mit Stahl unter Belastung?

Rostfreier Stahl muss höchsten Belastungen standhalten. Um abzuschätzen, wann das Material ermüden könnte, muss man wissen, wo Belastungen das Gefüge verändern. Teams am HZB haben eine neue Methode der Bildgebung mit Neutronen entwickelt, mit der sich die kristallinen Phasen und ihre Veränderung durch Belastung innerhalb der Probe sehr genau kartieren lassen.

2009

Gründung des Helmholtz-Zentrums Berlin für Materialien und Energie (HZB)

2011

Eröffnung des Kompetenzzentrums Dünnschicht- und Nanotechnologie für Photovoltaik Berlin (PVcomb)

2012

BESSY II wird auf Top-up-Modus umgestellt, um kontinuierlich Elektronenpakete zu injizieren

2015

Spatenstich für den Prototyp eines Linearbeschleunigers mit Energierückgewinnung (bERLinPro)

2016

Einweihung des Energieforschungslabors EMIL@BESSY II

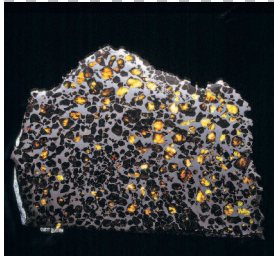
2017

3000. Augentumor-Patient mit Protonen am HZB behandelt

2017

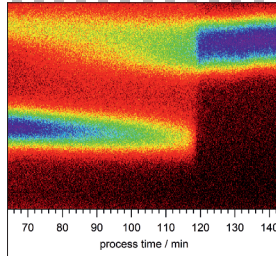
Bewilligung des Upgrades BESSY VSR (Variabler Pulslängen-Speicherring)

Am 1. Januar 2009 wurde das **Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie** gegründet. Es entstand durch die Fusion des Hahn-Meitner-Instituts und der Berliner Gesellschaft für Synchrotronstrahlung, die 1998 die **Synchrotronquelle BESSY II** in Adlershof in Betrieb genommen hatte. Seit 20 Jahren wird dort Spitzenforschung auf höchstem Niveau betrieben, seit zehn Jahren gemeinsam mit der am Wannsee befindlichen Neutronenquelle BER II unter dem Dach des HZB. Ein Rückblick mit Highlights aus der Forschung.



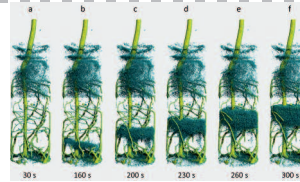
2015
Nachrichten aus dem Weltraum

Geologen haben Proben aus dem Pallasite-Meteoriten an BESSY II untersucht. Sie identifizierten winzige Partikel, die sich während der frühen Phase des Sonnensystems magnetisch ausgerichtet hatten. Der Meteorit speichert so wie eine Festplatte Informationen über unser frühes Sonnensystem.



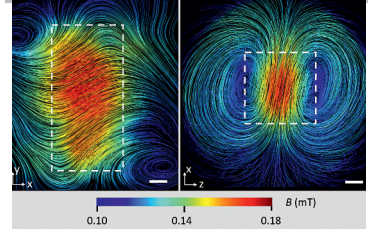
2016
Defekte in Chalkopyrit-Solarzellen

Ein wichtiges Ergebnis für die Optimierung von Dünnschicht-Solarzellen aus Kupfer, Indium, Gallium und Selen erzielten Forschende an BESSY II. Sie beobachteten Defekte während der Deposition und zeigten, dass viele Defekte beim Übergang von der kupferarmen in die kupferreiche Phase von selbst verschwinden.



2017
Lupinenwurzeln beim Trinken zugeschaut

Wie Lupinen mit ihren Wurzeln im Boden Wasser ziehen, hat ein Team der Universität Potsdam an BER II erstmals in 3D beobachtet. Dafür verbesserten sie zusammen mit der HZB-Bildgebungsgruppe die Zeitauflösung der Neutronentomographie zur Analyse dynamischer Prozesse gleich um mehr als das Hundertfache.



2018
Neutronen tasten Magnetfelder im Innern von Proben ab

Mit Hilfe einer neu entwickelten Neutronen-Tomographie-Methode hat ein HZB-Team erstmals den Verlauf von magnetischen Feldlinien im Innern von Materialien abbilden können. Die „Tensorielle Neutronen-Tomographie“ verspricht neue Einblicke in Supraleiter, Batterie-Elektroden und andere Energiematerialien (*mehr dazu auf Seite 23*).



Michael Müller
Regierender Bürgermeister von Berlin; Senator für Wissenschaft und Forschung
„Das Helmholtz Zentrum Berlin für Materialien und Energie erforscht wichtige Zukunftsthemen und zählt zu den TOP-Institutionen weltweit.

Mit seinem hochmotivierten Team in Adlershof und Wannsee ist das HZB ein unverzichtbarer Partner in der Berliner Wissenschaftslandschaft und leistet einen großen Beitrag für unsere Stadt als Standort der Spitzenforschung. Ich gratuliere zum runden Jubiläum und wünsche für die nächsten zehn Jahre viel Erfolg!“

ENTWICKLUNG DES HZB IN DEN VERGANGENEN 10 JAHREN

85 ➔ **252**

Kooperationen in der Wissenschaft

64 ➔ **104**

Doktorandinnen und Doktoranden

1 ➔ **9**

Nachwuchsgruppen in der Forschung

0 ➔ **3**

Graduiertenschulen an Universitäten

9 ➔ **30**

Professorinnen und Professoren

1.064 ➔ **3.750**

Besuche im Schülerlabor

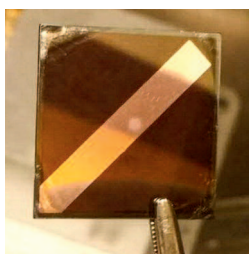
ENERGIEMATERIAL-FORSCHUNG



EINBLICK IN DIE VERLUSTPROZESSE BEI PEROWSKIT-SOLARZELLEN

Ein Forscherteam der Universität Potsdam hat gemeinsam mit dem HZB herausgefunden, wo die Ladungsträger in **Perowskit-Solarzellen durch Rekombination von Defekten** verloren gehen. Seine Ergebnisse tragen zur gezielten Verbesserung dieser Solarzellen bei.

Selbst Solarzellen aus einem perfekten Wundermaterial würden niemals hundert Prozent des Sonnenlichts in elektrische Energie umwandeln. Denn die theoretisch maximal erreichbare Leistung ist begrenzt durch die Lage der Energiebänder der Elektronen und durch die nicht vermeidbare Abstrahlung von Photonen (thermodynamische Grenze oder Shockley-Queisser-Grenze). Bei der Bandlücke von Silizium liegt diese Grenze bei 33 Prozent. Doch selbst dieser Wert wird in Wirklichkeit nicht erreicht. Denn Defekte unterschiedlicher Art sorgen dafür, dass ein Teil der durch Sonnenlicht freigesetzten Ladungsträger wieder verloren geht. Um sich dem Maximalwert anzunähern, gilt es daher, die verschiedenen Defekte in Solarzellen zu



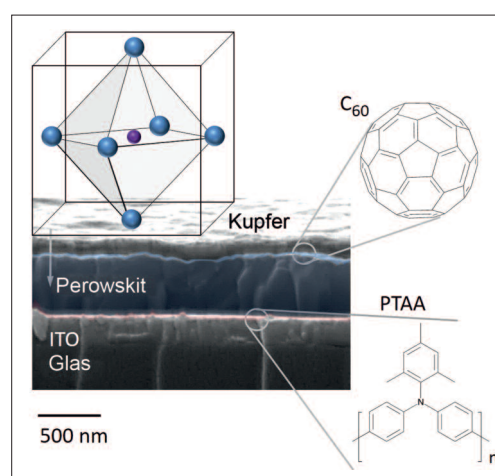
Die untersuchte Perowskit-Zelle hat bereits eine Fläche von einem Quadratzentimeter.

untersuchen und zu ermitteln, welche Defekte auf welche Weise zu Verlusten führen. Als besonders spannende, neue Materialklasse für Solarzellen gelten metallorganische Perowskit-Absorberschichten – in nur zehn Jahren ließ sich ihr Wirkungsgrad von drei Prozent auf mehr als 20 Prozent erhöhen – eine rasante Erfolgsgeschichte. Einem Team um Prof. Dr. Dieter Neher von der Universität Pots-

dam und Dr. Thomas Unold vom HZB ist es gelungen, die entscheidenden Verlustprozesse in Perowskit-Solarzellen zu identifizieren und damit ihren Wirkungsgrad deutlich zu verbessern. An bestimmten Defekten im Kristallgitter der Perowskit-Schicht können Ladungsträger, also Elektronen oder „Löcher“, die gerade durch Sonnenlicht freigesetzt wurden, wieder rekombinieren und so verloren gehen. Ob diese Defekte aber bevorzugt im Inneren der Perowskit-Schicht sitzen oder eher an der Grenzfläche zwischen Perowskit- und Transportschicht, das war bislang unklar.

Verluste im Detail analysiert

Um dies herauszufinden, nutzten die Kooperationspartner die Methode der Photolumineszenz mit hoher Orts- und



Mit zusätzlichen Beschichtungen zwischen dem Perowskit-Halbleiter und den Loch- und Elektronentransportschichten (rote und blaue Linien) konnte das Team der Uni Potsdam den Wirkungsgrad weiter steigern.

Zeitauflösung. Mit Laserlicht regten sie die quadratzentimetergroße Perowskit-Schicht an und erfassten, wo und wann das Material als Antwort auf die Anregung wiederum Licht abstrahlte. „Diese Messmethode ist bei uns so präzise, dass wir die Anzahl der ausgestrahlten Photonen genau angeben können“, erklärt Unold. Und nicht nur das, auch die Energie der abgestrahlten Photonen wurde mit einer hyperspektralen CCD-Kamera genau erfasst und analysiert. „Wir konnten so an jedem Punkt der Zelle die Verluste ausrechnen und dabei feststellen, dass sich die schädlichsten Defekte an den Grenzflächen zwischen der Perowskit-Absorberschicht und den Ladungstransportschichten befinden“, berichtet Unold. Mithilfe dieser Erkenntnisse ist es der Gruppe um Dieter Neher und Dr. Martin Stollerfoht an der Universität Potsdam gelungen, die Grenzflächenrekombination zu verringern und dadurch den Wirkungsgrad der einen Quadratzentimeter großen Perowskit-Solarzellen auf mehr als 20 Prozent zu erhöhen. arö

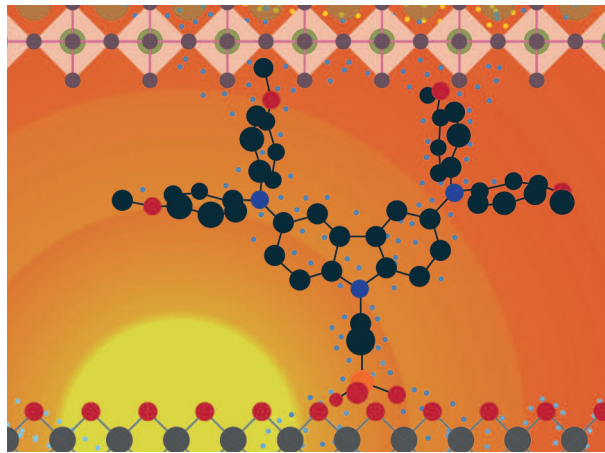
Nature Energy, 2018 (DOI: 10.1038/s41560-018-0219-8): Visualization and suppression of interfacial recombination for high-efficiency large-area pin perovskite solar cells; M. Stollerfoht, C. M. Wolff, J. A. Márquez, S. Zhang, C. J. Hages, D. Rothhardt, S. Albrecht, P. L. Burn, P. Meredith, T. Unold and D. Neher

SELBSTORGANISIERTE, MOLEKULARE MONOLAGEN FÜR EFFIZIENTE PEROWSKIT-SOLARZELLEN

Ein Team am HZB hat ein neues Verfahren entwickelt, um **effiziente Kontaktschichten in Perowskit-Solarzellen** zu realisieren: Es basiert auf Molekülen, die sich selbstorganisierend anordnen und eine Monolage bilden.

Der Wirkungsgrad von Solarzellen auf der Basis von Metall-Halid-Perowskiten ist in den vergangenen Jahren enorm gestiegen. Diese Materialien versprechen kostengünstige und flexible Solarzellen und können mit konventionellen PV-Materialien zu besonders effizienten Tandem-Solarzellen kombiniert werden. Ein wichtiger Schritt zur Industriereife ist die Entwicklung effizienter elektrischer Kontaktschichten, die die Abscheidung von Perowskit-Schichten auf unterschiedlichen Substraten erlauben.

Ein Team um den HZB-Physiker Dr. Steve Albrecht hat in Zusammenarbeit mit dem ehemaligen DAAD-Austauschstudienten Artiom Magomedov von der Kaunas University of Technology (KTU) in Litauen ein neuartiges selbstorganisierendes Monolagen-Molekül (engl.: *self-assembled monolayer*, SAM) synthetisiert und erfolgreich als lochleitende Schicht in Perowskit-Solarzellen eingesetzt. Das Molekül ist Carbazol-basiert und bindet sich durch eine Phosphonsäure-Gruppe an das Oxid der transparenten Elektrode. Dabei organisiert sich dieses Molekül selbstständig an der Elektrodenoberfläche, bis eine geschlossene Monolage entsteht. Diese ultradünne Schicht zeigt keine optischen Verluste und könnte durch die Selbstorganisation konform



Das Molekül organisiert sich entlang der Oberfläche der Elektroden, bis eine geschlossene Monolage entsteht.

alle Oberflächen bedecken, also auch texturiertes Silizium in Tandemarchitekturen. Mit dieser Technik erreicht man einen äußerst geringen Materialverbrauch und die chemische Struktur der SAMs kann je nach Anwendungsgebiet angepasst werden. Damit könnten die SAMs auch als Modellsystem für zukünftige Untersuchungen der Grenzflächeneigenschaften oder des Perowskit-Wachstums dienen. Die Arbeiten fanden am HySPRINT-Labor des HZB statt, wo die Gruppe um Albrecht an einer neuen Generation von selbstorganisierenden Molekülen für Kontaktschichten forscht, mit denen die Solarzellen nunmehr Wirkungsgrade von mehr als 21 Prozent erreichen.

Da dieser Ansatz für Perowskit-Solarzellen noch nie vorher in Betracht gezogen wurde und das Potenzial hat, für die industrielle Implementierung eine Rolle zu spielen, haben die Teams vom HZB und der KTU das Molekül und die Anwendung zur Patentanmeldung eingereicht. *Amran Al Ashouri*

NEUE REKORDE BEI PEROWSKIT-SILIZIUM-TANDEM-SOLARZELLEN

Durch mikrostrukturierte Schichten konnte ein HZB-Team den Wirkungsgrad von Perowskit-Silizium-Tandemsolarzellen auf aktuell 25,5 Prozent steigern, dem höchsten Wert, der bis 2018 erreicht werden konnte. Gleichzeitig gelang es mit Hilfe von rechnerischen Simulationen, die Lichtumwandlung in verschiedenen Zelldesigns zu untersuchen. Diese Modellierungen ermöglichen die Optimierung des Lichtmanagements sowie detaillierte Ertragsanalysen. *arö*

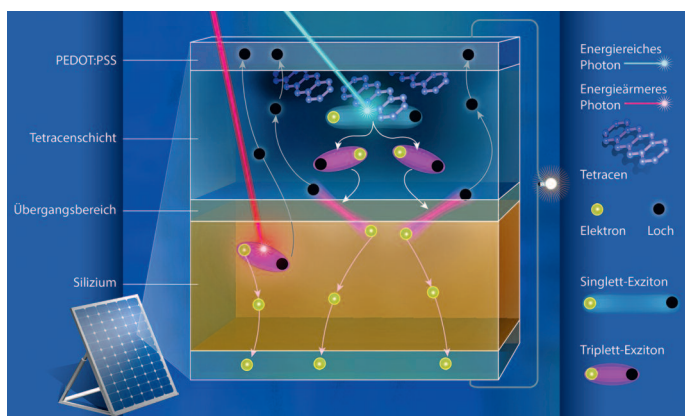
Energy & Environmental Sciences, 2018 (DOI: 10.1039/C8EE02469C): Textured interfaces in monolithic perovskite/silicon tandem solar cells: Advanced light management for improved efficiency and energy yield; M. Jošt et al.

Advanced Energy Materials, 2018 (DOI: 10.1002/aenm.201870139): Self-Assembled Hole Transporting Monolayer for Highly Efficient Perovskite Solar Cells; A. Magomedov et al.

NEUER WEG FÜR EFFIZIENTERE SILIZIUM-SOLARZELLEN

Einem Team am HZB ist es gemeinsam mit internationalen Kollegen gelungen, den **theoretischen Wirkungsgrad einer Silizium-Solarzelle** zu übertreffen. Dafür bauten sie organische Schichten in die Solarzelle ein, die die Stromausbeute in einem Energiebereich verdoppeln.

Einfallende Lichtteilchen (Photonen) erzeugen im Halbleiter einer Solarzelle Ladungsträger. Normalerweise erzeugt ein Photon immer ein Ladungsträgerpaar, das an den ladungselektiven Kontakten der Solarzelle getrennt wird. Dem Team um HZB-Forscher Prof. Dr. Klaus Lips ist es gelungen, die Solarzelle so zu bauen, dass bestimmte Photonen aus dem Lichtspektrum zwei Ladungsträgerpaare auf einmal erzeugen können. Der Effekt, den sie hierfür nutzen, tritt in bestimmten organischen Molekülkristallen auf und heißt „Singlet exciton fission“ (SF). Er wird wirksam, wenn die Ladungsträgerpaare gewisse quantenphysikalische Bedingungen erfüllen: alle ihre Eigendrehimpulse (Spins)



Darstellung des Prinzips einer Silizium-Multiplikatorsolarzelle mit organischen Kristallen.

müssen parallel ausgerichtet sein – sie befinden sich dann in einem sogenannten Tripletzustand. Diese Triplet-Exzitonen sind recht langlebig und stark aneinander gebunden. Eine Schwierigkeit ist daher, die Triplet-Paare aus dem organischen Material an der Grenzfläche zu Silizium auseinanderzureißen, sodass die frei werdenden positiven und negativen Ladungsträger zum Strom der Solarzelle beitragen können. In einem richtungsweisenden Experiment haben die HZB-Forscher gezeigt, dass die Trennung der Triplet-Paare möglich ist, und die Quantenausbeute pro Photon verdoppelt werden kann. „Damit lässt sich der theoretisch maximale

Wirkungsgrad einer Silizium-Solarzelle auf circa 40 Prozent steigern“, sagt der Australier Dr. Rowan MacQueen, der die Ladungsträgermultiplikator-Solarzelle am HZB realisiert.

Blau-grüner Lichtanteil wird besser genutzt

Im Experiment haben die Forscher eine nur 100 Nanometer dünne organische Schicht aus Tetracene-Kristallen in die Oberfläche einer Silizium-Solarzelle integriert. Mittels spektroskopischer Untersuchungen konnten sie die Triplet-Ladungsträgerpaare in der Tetracene-Schicht nachweisen. „Die Herausforderung bestand darin, die Tetracene-Schicht so einzubauen, dass der Stromfluss der Siliziumsolarzelle

nicht nennenswert gestört wird“, erläutert Klaus Lips, denn immerhin grenzt eine schlecht leitende organische Schicht an eine gut leitende Silizium-Schicht. Eine Konstellation, die den Stromfluss schnell zum Erliegen bringt. Die Trennung gelingt mit einem zusätzlich eingebrachten organischen Leiter, genannt PEDOT:PSS. Eine weitere organische Schicht ist also notwendig. „In diesem Aufbau spielen die Grenzschichten der Materialien eine besondere Rolle, weshalb das Röntgenlicht von BESSY II das richtige Werkzeug für die Analytik ist“, betont MacQueen. Die Messergebnisse zeigten, dass Tetracene den blau-grünen Anteil des Lichts verwertet, die energieärmeren Photonen werden vom Silizium absorbiert. Mit einer Simulation berechneten die Forscher, dass derzeit fünf bis zehn Prozent der erzeugten Triplet-Paare dem Solarstrom zugefügt werden.

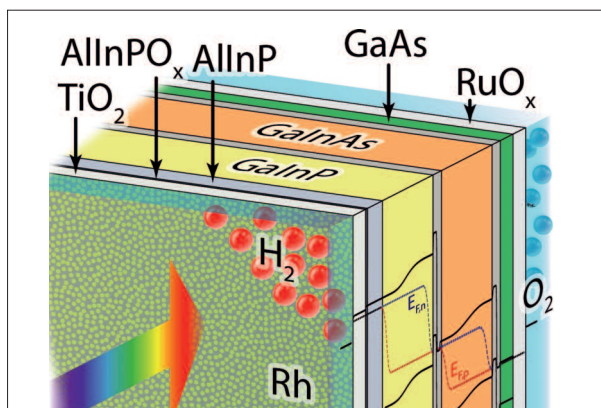
Lips wertet dies als Erfolg: „Der zusätzliche Stromfluss, der durch die Huckepackschicht erzeugt wird, ist zwar noch nicht sehr groß, jedoch haben wir mit dieser Struktur gezeigt, dass der Ansatz prinzipiell funktioniert. Und wir wissen bereits, was wir tun müssen, um die Ausbeute an getrennten Triplet-Exzitonen auf bis zu 200 Prozent zu erhöhen.“ *ih*

Materials Horizon, 2018 (DOI: 10.1039/c8mh00853a): Crystalline silicon solar cells with tetracene interlayers: the path to silicon-singlet fission heterojunction devices; R. W. MacQueen et. al.

WELTREKORD BEI DER DIREKTEN SOLAREN WASSERSPALTUNG

Einem internationalen Forscherteam ist es am HZB-Institut für Solare Brennstoffe gelungen, den Wirkungsgrad für die direkte **solare Wasserspaltung zur Wasserstoffgewinnung** auf 19 Prozent zu steigern. Sie kombinierten dafür eine Tandem-Solarzelle aus III-V-Halbleitern mit Rhodium-Nanopartikeln und kristallinem Titandioxid.

Sonnenlicht in Form von chemischer Energie zu speichern, indem man damit Wasserstoff produziert, ist ein viel versprechender Weg für eine nachhaltige Energieversorgung. Denn Wasserstoff lässt sich gut speichern und vielseitig nutzen. Kombiniert man Solarzellen mit Katalysatoren und weiteren funktionalen Schichten zu einer „monolithischen Photoelektrode“ aus einem Block, wird die Aufspaltung von Wasser besonders einfach: Dabei



Aufbau der Photokathode: Licht fällt durch die transparente Schutzschicht mit katalytisch aktiven Rhodium-Partikeln in die Tandemzelle.

befindet sich die Photokathode im wässrigen Medium, und wenn Licht auf sie fällt, bildet sich auf der Vorderseite Wasserstoff, auf der Rückseite Sauerstoff.

Ein Forschungsteam des California Institute of Technology (Caltech), der University of Cambridge und der TU Ilmenau hat für seine monolithische Photokathode eine am Fraunhofer Institut für Solare Energiesysteme entwickelte hoch-effiziente Tandem-Zelle aus III-V-Halbleitern mit weiteren funktionalen Schichten kombiniert. Dabei gelang es, die Verluste durch Lichtreflexion und Absorption an der Oberfläche deutlich zu verringern. „Darin besteht auch die Innovation“, erläutert Prof. Dr. Hans-Joachim Lewerenz vom Caltech: „Denn bereits 2015 konnten wir einen Wirkungsgrad von mehr als 14 Prozent erreichen, damals ein Weltrekord. Hier

haben wir die Antikorrosionsschicht durch eine kristalline Titandioxid-Schicht ersetzt, die nicht nur hervorragende Antireflexionseigenschaften besitzt, sondern an der auch die Katalysator-Teilchen haften bleiben.“ Und Prof. Dr. Harry Atwater vom Caltech fügt an: „Außerdem haben wir ein neues elektrochemisches Verfahren genutzt, um die Rhodium-Nanoteilchen herzustellen, die als Katalysatoren für die Wasserspaltung dienen. Sie messen nur zehn Nanometer im Durchmesser und sind damit optisch nahezu transparent, also ideal geeignet für ihre Aufgabe.“

Verbesserungen bei der Stabilität

Unter simulierter Sonneneinstrahlung erzielten die Wissenschaftler in verdünnter, wässriger Perchlorsäure einen Wirkungsgrad von 19,3 Prozent, in neutralem Wasser von 18,5 Prozent. Dies reicht schon nah an den theoretisch maximalen Wirkungsgrad von 23 Prozent heran, der sich mit dieser Kombination von Schichten aufgrund ihrer elektronischen Eigenschaften erreichen lässt. „Die kristalline Titandioxid-Schicht schützt die eigentliche Solarzelle nicht nur vor Korrosion, sondern verbessert durch ihre günstigen elektronischen Eigenschaften auch den Ladungstransport“, sagt Dr. Matthias May, der einen Teil der Experimente zur Effizienzbestimmung am HZB-Institut für Solare Brennstoffe durchgeführt hat – im Vorläuferlabor der Solar Fuel Testing Facility der Helmholtz Energy Materials Foundry (HEMF). Der neue Rekordwert basiert auf Arbeiten, die May bereits als Doktorand am HZB begonnen hatte. „Die Stabilität konnten wir auf knapp 100 Stunden steigern. Das ist ein großer Fortschritt im Vergleich zu Vorgängersystemen, die bereits nach 40 Stunden korrodiert waren. Dennoch bleibt hier noch viel zu tun“, erklärt May. Teams am Fraunhofer ISE und der TU Ilmenau arbeiten daran, Zellen zu entwerfen, in denen III-V-Halbleiter mit dem preisgünstigsten Silizium kombiniert werden, was die Kosten erheblich senken könnte. arö

ACS Energy Letters, 2018 (DOI: 10.1021/acsenergylett.8b00920): Monolithic Photoelectrochemical Device for Direct Water Splitting with 19 % Efficiency; W.-H. Cheng et. al.

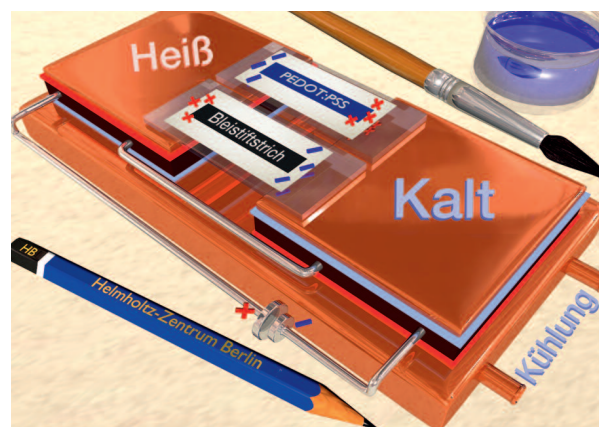
MIT BLEISTIFT UND PAPIER WÄRME IN STROM UMWANDELN

Thermoelektrische Materialien können **Wärmeunterschiede zur Stromerzeugung** nutzen. Ein Team am HZB hat demonstriert, wie man diesen Effekt mit einfachsten Materialien preiswert und umweltfreundlich erzielen kann.

Der thermoelektrische Effekt ist keine Neuigkeit, sondern wurde vor fast 200 Jahren von Thomas J. Seebeck entdeckt: Bringt man zwei unterschiedliche Metalle zusammen, dann kann eine elektrische Spannung entstehen, wenn ein Metall wärmer ist als das andere. Über diesen Effekt lässt sich Restwärme teilweise in elektrische Energie umwandeln. Restwärme entsteht als Nebenprodukt bei fast allen technischen und natürlichen Prozessen, zum Beispiel in Kraftwerken und in jedem Haushalt, aber auch im menschlichen Körper. Sie ist eine der größten ungenutzten Energiequellen auf der Erde – meist verpufft sie wirkungslos.

Leider ist dieser an sich so nützliche Effekt in normalen Metallen extrem klein. Denn Metalle besitzen nicht nur eine hohe Leitfähigkeit für Strom, sondern ebenso für Wärme, sodass Unterschiede in der Temperatur sofort verschwinden. Thermoelektrische Materialien müssen also trotz einer hohen elektrischen Leitfähigkeit eine geringe Wärmeleitfähigkeit haben. In der Technik werden heute schon stellenweise Thermoelektrika aus anorganischen Halbleitermaterialien wie Bismuttellurid eingesetzt. Allerdings sind solche Materialsysteme teuer und ihr Einsatz ist nur in Einzelfällen wirtschaftlich. Darüber hinaus werden für den Einsatz am menschlichen Körper auch flexible, ungiftige organische Materialien erforscht, die zum Beispiel auf Nanostrukturen aus Kohlenstoff basieren.

Dass es auch viel einfacher geht, hat nun ein Team um Prof. Dr. Norbert Nickel am HZB gezeigt: Mit einem normalen Bleistift, Härtegrad HB, zeichnen sie auf gewöhnlichem Kopierpapier eine kleine Fläche aus. Als zweites Material pinselten sie einen transparenten, leitfähigen Kunststofflack (PEDOT:PSS) auf. Konkret liefert das Graphit der Bleistift-Proben bei einem Temperaturunterschied von 50 Grad Celsius eine Spannung von 0,875 Millivolt. Dieses Ergebnis ist vergleichbar mit anderen, weitaus teureren Nanokompositen, die bisher für biegsame thermoelektrische Elemente genutzt werden. Und dieser Wert lässt sich verzehnfachen, indem die Forscher dem Graphit etwas Indium-Selenid zusetzen.



Skizze des Versuchsaufbaus: Ein normaler HB-Bleistift und Büropapier reichen aus, um – kombiniert mit einem leitfähigen Kunststofflack – ein thermoelektrisches Element zu bauen.

Winzige, aber höchst effiziente Bauelemente

Unter dem Rasterelektronenmikroskop und mit spektroskopischen Methoden (Raman-Streuung) untersuchten die Forscher am HZB die Graphit- und Kunststofflack-Filme. „Die Ergebnisse waren für uns auch sehr überraschend“, erklärt Nickel. „Aber wir haben nun eine Erklärung gefunden, warum dies so gut funktioniert. Der Bleistiftabrieb bildet auf dem Papier eine Fläche aus ungeordneten Graphitflocken, etwas Graphen und Lehm. Während dies die elektrische Leitfähigkeit nur wenig reduziert, kann Wärme deutlich schlechter transportiert werden.“ Mit diesen einfachen Zutaten könnten sich künftig thermoelektrische Bauelemente auf Papier drucken lassen, die äußerst preiswert, umweltfreundlich und ungiftig sind. Solche winzigen und biegsamen Bauelemente wären auch direkt am Körper einsetzbar und könnten die Körperwärme nutzen, um kleine Geräte oder Sensoren zu betreiben. arö

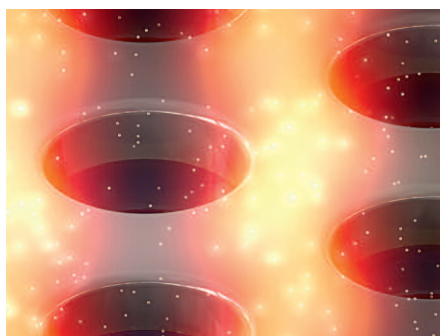
ACS Appl. Mater. Interfaces, 2018 (DOI: 10.1021/acsami.7b17491): Fine Art of Thermoelectricity; V. Brus, M. A. Gluba, J. Rappich, F. Lang, P. Maryanchuk and N. H. Nickel

MASCHINELLES LERNEN FÜR BESSERE PHOTONIK-ANWENDUNGEN

Photonische Nanostrukturen verbessern die Wirksamkeit von optischen Sensoren, die zum Beispiel als Krebsmarker verwendet werden. Mit Computersimulationen und dem Einsatz von maschinellem Lernen hat ein Team am HZB gezeigt, wie sich das **Design solcher Nanostrukturen** gezielt verbessern lässt.

Mit Nanostrukturen lässt sich die Empfindlichkeit von optischen Sensoren enorm steigern – sofern die Geometrie bestimmte Bedingungen erfüllt und zur Wellenlänge des eingestrahlt Lichts passt. Denn das elektromagnetische Feld des Lichts kann durch die Nanostruktur lokal extrem verstärkt oder abgeschwächt werden. Am HZB arbeitet die Nachwuchsgruppe „Nano-SIPPE“ um Prof. Dr. Christiane Becker daran, solche Nanostrukturen

Die Computersimulation zeigt, wie sich nach Anregung mit einem Laser in der Siliziumschicht mit Lochmuster das elektromagnetische Feld verteilt. Hier bilden sich Streifen mit lokalen Feldmaxima aus, sodass Quantenpunkte besonders stark leuchten.



gezielt zu entwickeln. Ein wichtiges Werkzeug dabei sind Computersimulationen. Dr. Carlo Barth aus Beckers Team hat nun mit Einsatz von maschinellem Lernen die wichtigsten Muster der Feldverteilung in einer Nanostruktur identifiziert und damit auch erstmals sehr gut die experimentellen Befunde erklärt.

Licht bringt Quantenpunkte zum Leuchten

Die in dieser Arbeit betrachteten photonischen Nanostrukturen bestehen aus einer Siliziumschicht mit einem regelmäßigen Lochmuster, die mit Quantenpunkten aus Bleisulfid beschichtet ist. Angeregt mit einem Laser leuchten die Quantenpunkte durch die lokalen Felderhöhungen wesentlich stärker als auf einer unstrukturierten Oberfläche. Damit lässt sich experimentell zeigen, wie das Laserlicht in Wechselwirkung mit der Nanostruktur tritt. Um nun systematisch zu erfassen, was passiert, wenn sich einzelne Parameter der Nanostruktur verändern, berechnete Barth unter Verwendung einer am Zuse-Institut Berlin entwickelten Software für jeden Parametersatz die dreidimensionale Feldverteilung.

Diese enormen Datenmengen ließ Barth dann von weiteren Computerprogrammen analysieren, die auf Methoden des maschinellen Lernens basieren. „Der Rechner hat die rund 45.000 Datensätze durchforstet und in etwa zehn unterschiedliche Muster gruppiert“, erklärt Barth. Schließlich gelang es ihnen unter anderen drei Grundmuster herauszukristallisieren, bei denen in verschiedenen spezifischen Bereichen der Nanolöcher die Felder verstärkt sind. Dies ermöglicht die Optimierung von photonischen Kristallmembranen für praktisch jede Anwendung, die auf Anregungsverstärkung basiert. Denn je nach Anwendung lagern sich manche Biomoleküle zum Beispiel bevorzugt entlang der Lochränder an, andere eher auf den Plateaus zwischen den Löchern. Mit der richtigen Geometrie und der passenden Anregung durch Licht ließe sich dann die maximale Feldverstärkung exakt an den Anlagerungsplätzen der gesuchten Moleküle erzeugen. Damit ließe sich die Sensitivität von optischen Sensoren, beispielsweise für Krebsmarker, bis auf das Niveau von Einzelmolekülen erhöhen. arö

Communications Physics, 2018 (DOI: 10.1038/s42005-018-0060-1): Machine learning classification for field distributions of photonic modes; Carlo Barth and Christiane Becker

MATERIALDESIGN DANK RÖNTGENANALYSE

Nanostrukturen aus Kohlenstoff können in Batterien und Superkondensatoren Ionen aufnehmen, Gase speichern oder Wasser entsalzen. Wie gut sie diese Aufgaben meistern, hängt von Größe und Form der Nanoporen ab, die sich über die Temperatur während der Synthese stark verändern lassen. Bisher war es nur möglich, Form, Größe sowie die Verteilung der Nanoporen ungefähr abzuschätzen. Eine neue Studie zeigt, dass sich solche Informationen direkt und zuverlässig mit Hilfe der Kleinwinkel-Röntgenstreuung gewinnen lassen. arö

Carbon, 2019 (DOI: 10.1016/j.carbon.2019.01.076): Carbide Derived Carbons Investigated by Small Angle X-ray Scattering: Inner Surface and Porosity vs. Graphitization; E. Härk et. al.

NANODIAMANTEN ALS GÜNSTIGE PHOTOKATALYSATOREN

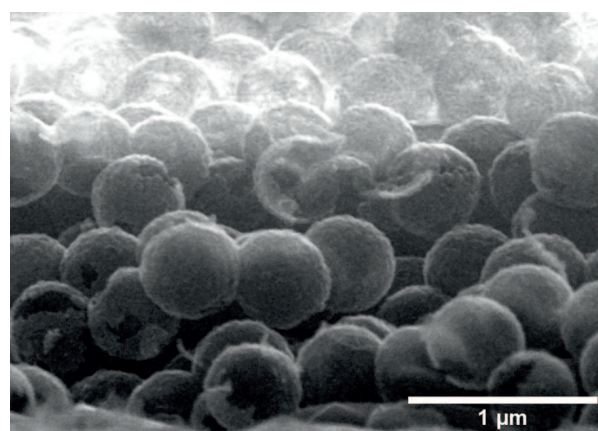
Forscher haben im Rahmen des EU-Projekts DIACAT Diamant-Materialien mit Bor dotiert und an BESSY II gezeigt, wie sie deren photokatalytischen Eigenschaften deutlich verbessern könnten. Das öffnet den Weg für die **Herstellung von Methanol aus Wasser und CO₂**.

Um den Klimawandel aufzuhalten, ist es notwendig, die CO₂-Emissionen deutlich zu reduzieren. Dafür brauchen wir alle Optionen. Eine Idee ist, das Treibhausgas CO₂ wieder in den Energiekreislauf zurückzuführen: CO₂ könnte mit Wasser zu Methanol verarbeitet werden, einem Brennstoff, der sich hervorragend transportieren und speichern lässt. Die Reaktion, die an einen Teilprozess der Photosynthese erinnert, erfordert jedoch Energie und günstige Katalysatoren. Falls es gelingt, diese Energie aus Sonnenlicht zu nutzen und lichtaktive Photokatalysatoren zu entwickeln, die nicht aus seltenen Metallen wie Platin bestehen, sondern aus preisgünstigen und reichlich vorhandenen Materialien, gäbe es eine Chance auf klimaneutral erzeugte Treibstoffe.

Ein Kandidat für solche Photokatalysatoren sind sogenannte Diamant-Nanomaterialien. Dabei handelt es sich nicht um kostbare kristalline Diamanten, sondern um winzige Nanokristalle aus wenigen Tausend Kohlenstoffatomen, die wasserlöslich sind und wie schwarzer Schlamm aussehen oder auch um nanostrukturierte „Kohlenstoff-Schäume“ mit sehr großen Oberflächen. Damit diese Materialien katalytisch aktiv werden, benötigen sie jedoch Anregung durch UV-Licht. Nur dieser Spektralbereich des Sonnenlichts ist energiereich genug, um Elektronen aus dem Material in einen „freien Zustand“ zu befördern, sodass die Reaktion zwischen Wasser und CO₂ zu Methanol gelingt.

Dotieren mit Bor erweitert die Bandlücke

Allerdings ist der UV-Anteil im Sonnenspektrum nicht sehr hoch. Ideal wären Photokatalysatoren, die auch das sichtbare Spektrum des Sonnenlichts nutzen könnten. Hier setzt die Arbeit von HZB-Forscher Dr. Tristan Petit und seinen Kooperationspartnern im Rahmen von DIACAT an: Modellierungen von Prof. Dr. Karin Larsson von der Universität Uppsala hatten gezeigt, dass sich durch das Dotieren mit Fremdatomen bestimmte Zwischenstufen in die Bandlücke dieser Materialien einbauen lassen sollten. Als besonders geeignet erschien dabei das dreiwertige Element Bor. Petit und sein Team haben deshalb Proben aus polykristallinen Diamanten, Diamant-Schäumen und Nanodiamanten untersucht. Diese



Mit Fremdatomen dotierter Schaum aus Kohlenstoff verbessert die photokatalytischen Eigenschaften von Diamant-Materialien. Das macht sie zum Hoffnungsträger für die Herstellung von Methanol.

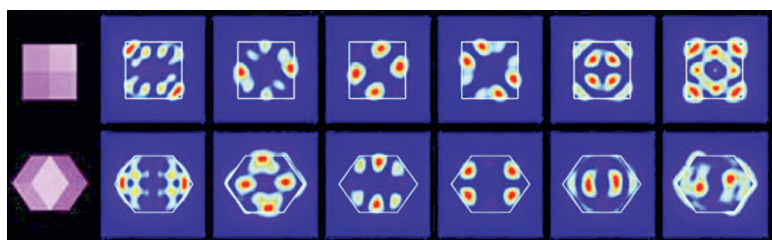
Proben waren zuvor von Gruppen um Prof. Dr. Anke Krüger, Würzburg, und Dr. Christoph Nebel, Freiburg, synthetisiert und im Anschluss mit dem Element Bor dotiert worden. An BESSY II konnten mit Hilfe von Röntgenabsorptionsspektroskopie bestimmte Energiezustände der Elektronen vermessen werden. „Die Bor-Atome, die sich an den Oberfläche dieser Nanodiamanten befinden, führen tatsächlich zu den erwünschten Zwischenstufen in der Bandlücke“, erklärt Sneha Choudhury, Erstautorin der Studie. Allerdings befinden sich diese Zwischenstufen sehr nahe an den Leitungsbändern, ermöglichen also bislang nicht, sichtbares Licht zu nutzen. Wie die Messungen zeigten, hängt dies jedoch auch vom Aufbau der Nanomaterialien ab. „Wir können solche zusätzlichen Stufen in der Bandlücke solcher Diamantmaterialien durch gezieltes Verändern der Morphologie und Dotieren einführen und möglicherweise kontrollieren“, sagt Tristan Petit. Auch das Dotieren mit Phosphor oder Stickstoff könnte weitere Chancen bieten. arö

Journal of Materials Chemistry A, 2018 (DOI: 10.1039/c8ta05594g): Combining nanostructuring with boron doping to alter sub band gap acceptor states in diamond materials; S. Choudhury et. al.

LEUCHTENDE NANOARCHITEKTUREN AUS GALLIUMARSENID

Ein Team am HZB hat erfolgreich **Nanokristalle aus Galliumarsenid** auf winzigen Säulen aus Silizium und Germanium aufgebracht. Damit lassen sich auf der Basis von Siliziumchips sehr effiziente Bauelemente in für die Optoelektronik interessanten Frequenzbereichen realisieren.

Halbleiter aus Galliumarsenid besitzen im Vergleich zu Silizium deutlich bessere optoelektronische Eigenschaften, die sich mit Nanostrukturierungen gezielt beeinflussen lassen. Eine besonders interessante Nanostrukturierung ist dem Team um Dr. Sebastian Schmitt und Prof. Dr. Silke Christiansen gelungen. Aus Australien hatten sie einen Silizium-Wafer erhalten, der mit einer überraschend kristallinen Germaniumschicht bedeckt war. Germanium besitzt fast die gleiche Gitterkonstante wie Galliumarsenid und bietet sich daher als Unterlage an. In diesen Wafer ätzten sie im Abstand von einigen Mikrometern tiefe Gräben ein, bis nur noch eine Reihe feiner Siliziumsäulen mit einem Häubchen aus Germanium auf dem Substrat stehen blieb. Galliumarsenid wurde dann mit metallorganischer Gasphasenepitaxie abgeschieden. So lagerten sich systematisch Gallium- und Arsenatome auf dem Germaniumhäubchen ab und bildeten einen winzigen, nahezu perfekten Kristall. „Das Germanium wirkt hier wie ein Kristallisationskeim“, erklärt Schmitt, Erstautor der Arbeit. Die Nanoarchitektur sieht unter dem Elektronenmikroskop spektakulär aus. Auf den ersten Blick meint man, auf jeder Siliziumnadel einen Würfel zu erkennen, der auf der Spitze steht. Auf den zweiten Blick zeigt sich: Es ist



Hier sind die sechs optischen Resonanzmoden zu sehen, die in einem Rhombendodekaeder entlang zweier verschiedener Querschnitte möglich sind.

in Wirklichkeit ein Rhombendodekaeder – jede der zwölf Flächen ein identischer Rhombus.

Entscheidende Parameter: Geometrie und Größe

Tatsächlich zeigte diese Nanostruktur nach Anregung mit einem Laser eine außergewöhnlich starke Lichtemission, und zwar insbesondere im nahinfraroten Bereich. „Während des Wachstums der Galliumarsenid-Kristalle werden auch Germanium-Atome in das Kristallgitter eingebaut“, erklärt Schmitt. Dieser Einbau von Germanium führt zu zusätzlichen Energieniveaus für Ladungsträger, die beim Zurückfallen auf ihre ursprünglichen Niveaus Licht abgeben. Dieses Licht wird in optischen Resonanzen des hochsymmetrischen Nanokristalls verstärkt, und die Frequenz dieser Resonanzen lässt sich über Größe und Geometrie der Kristalle gezielt steuern. Im Experiment konnte eine Vielzahl dieser optischen Resonanzen nachgewiesen werden, die auch gut mit den numerischen Berechnungen übereinstimmen. „Weil sich die optischen und elektronischen Eigenschaften von Halbleitern durch Nanostrukturierung stark modifizieren lassen, eignen sich solche Materialarchitekturen hervorragend dazu, neuartige Sensoren, Leuchtdioden oder Solarzellen zu entwickeln“, sagt Schmitt. arö

Advanced Optical Materials, 2018 (DOI: 10.1002/adom.201701329): Germanium template assisted integration of gallium arsenide nanocrystals on silicon: a versatile platform for modern optoelectronic materials; S. W. Schmitt et. al.

STREITFRAGE NACH 40 JAHREN GELÖST

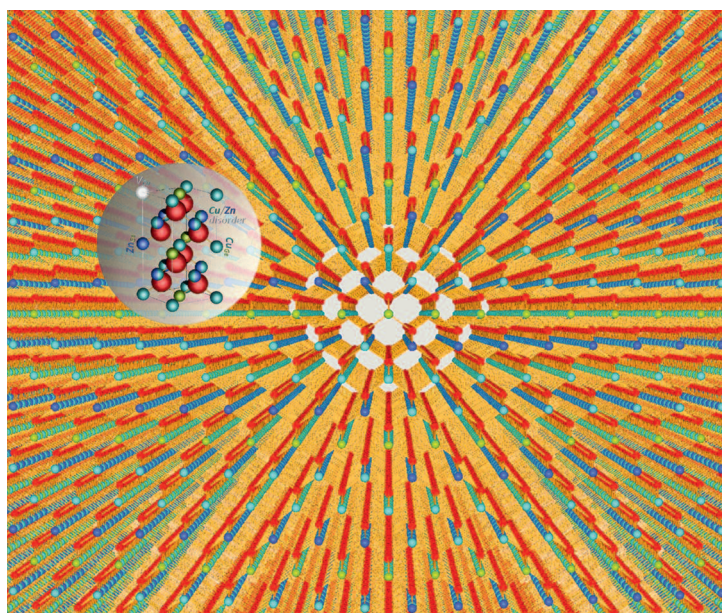
Ein internationales Team um Prof. Oliver Rader hat an BESSY II gezeigt, dass Samariumhexaborid kein topologischer Isolator ist. Durch einen Quanteneffekt wird dieses metallische Material bei sehr tiefen Temperaturen zu einem Kondo-Isolator, zeigt aber dennoch eine Restleitfähigkeit. Theoretische und erste experimentelle Arbeiten hatten darauf hingedeutet, dass dies auf einen topologischen Isolator schließen lässt. Das Team hat nun eine überzeugende alternative Erklärung vorgestellt. arö

Nature Communication, 2018 (DOI: 10.1038/s41467-018-02908-7): Samarium hexaboride is a trivial surface conductor; P. Hlawenka et. al.

GERMANIUM VERBESSERT SOLARZELLEN AUS KESTERITEN

Durch gezielte Veränderungen der Zusammensetzung von Kesterit-Halbleitern lässt sich ihre Eignung als **Absorbermaterial in Solarzellen** verbessern. Ein Team am HZB hat gezeigt, dass dies besonders für Kesterite gilt, in denen Zinn durch Germanium ersetzt wurde.

Kesterite sind Halbleiterverbindungen aus den Elementen Kupfer, Zinn, Zink und Selen. Diese Halbleiter lassen sich als Absorbermaterial in Solarzellen nutzen, schaffen aber bisher nur Wirkungsgrade von maximal 12,6 Prozent, während Solarzellen aus Kupfer-Indium-Gallium-Selenid (CIGS) bereits mehr als 20 Prozent erreichen. Dennoch gelten Kesterite als interessante Alternative zu CIGS-Solarzellen, weil sie aus häufig vorkommenden Elementen bestehen, sodass bei der Herstellung keine Lieferengpässe zu erwarten sind. Ein Team um Prof. Dr. Susan Schorr am HZB hat nun eine Reihe von „nicht-stöchiometrischen“ Kesterit-Proben untersucht und den Zusammenhang zwischen deren Zusammensetzung und ihren optoelektronischen Eigenschaften beleuchtet. Bei der Synthese der Proben am HZB wurden die Zinn-Atome durch Germanium ersetzt.



Die Illustration zeigt den typischen Aufbau eines Kristalls mit Kesteritstruktur, im Hintergrund sind die Kristallstruktur und die Elementarzelle angedeutet.

Mit Neutronen Elemente klar unterscheiden

Diese Proben untersuchten die Forscher mit Neutronenbeugung am BER II. Denn mit dieser Methode lassen sich die Elemente Kupfer, Zink und Germanium besonders gut voneinander unterscheiden und ihre Positionen im Kristallgitter verorten. Die Diagnose: Kesterite mit einer leicht Kupfer-armen und Zink-reichen Zusammensetzung, wie sie auch in Solarzellen mit den höchsten Wirkungsgraden zu finden ist, weisen die geringste Konzentration an Punktdefekten sowie die niedrigste Kupfer-Zink-Unordnung auf. Je mehr Kupfer die Zusammensetzung enthält, desto mehr steigt die Konzentration von anderen Punktdefekten, die als eher abträglich für die Leistungsfähigkeit von Solarzellen gelten. Weitere Untersuchungen zeigten, wie die sogenannte Energiebandlücke von der Zusammensetzung der Kesterit-Pulverproben abhängt.

„Diese Bandlücke ist eine Eigenschaft der Halbleiter und bestimmt, welche Lichtfrequenzen im Material Ladungsträger freisetzen“, erklärt René Gunder, Erstautor der

Arbeit: „Wir wissen nun, dass Germanium die optische Bandlücke vergrößert und damit dem Material ermöglicht, einen größeren Anteil des Sonnenlichts in elektrische Energie umzuwandeln.“ Susan Schorr ergänzt: „Wir sind davon überzeugt, dass sich solche Kesterite nicht nur für Solarzellen eignen, sondern auch für andere Anwendungen in Frage kommen: So könnten Kesterite als Photokatalysatoren mit Hilfe von Sonnenlicht Wasser in Wasserstoff und Sauerstoff aufspalten und Solarenergie in Form von chemischer Energie speichern.“

arö

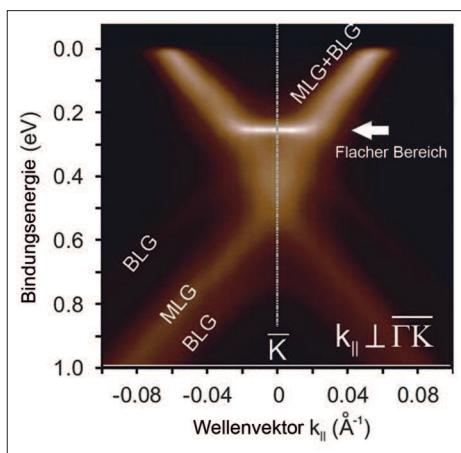
CrystEngComm, 2018 (DOI: 10.1039/c7ce02090b): Structural characterization of off-stoichiometric kesterite-type $\text{Cu}_2\text{ZnGeSe}_4$ compound semiconductors: From cation distribution to intrinsic point defect density; R. Gunder, J. A. Márquez-Prieto, G. Gurieva, T. Unold and S. Schorr

GRAPHEN AUF DEM WEG ZUR SUPRALEITUNG

Ein Forscherteam hat mithilfe der extrem hohen Auflösung des ARPES-Instruments an BESSY II die **Bandstruktur von Doppelschichten aus Graphen** mit hoher Präzision ausgemessen. Sie entdeckten dabei an einer überraschenden Stelle einen flachen Bereich, der eine bestimmte Form der Supraleitung ermöglicht.

Die Kohlenstoffatome in Graphen bilden ein zweidimensionales Netz mit sechseckigen Maschen: eine Honigwabenstruktur. Graphen leitet den Strom zwar sehr gut, ist bislang aber kein Supraleiter. 2018 zeigte eine Gruppe am Massachusetts Institute of Technology jedoch, dass sich in einer doppelten Lage aus Graphen eine Form der Supraleitung erzeugen lassen könnte: Dafür müssen die beiden aufeinandergelegten Honigwaben um einen „magischen Winkel“ von 1,1 Grad gegeneinander verdreht werden.

Die Messungen zeigen bei doppel-lagigem Graphen, dass die Bandstruktur einen flachen Bereich etwas unterhalb der Fermi-Energie aufweist.



Dies verändert die sogenannte Bandstruktur der Elektronen. Sie beschreibt, wie sich die Ladungsträger auf quantenmechanisch zulässige Energiezustände verteilen und welche Ladungsträger überhaupt für den Transport zur Verfügung stehen. Durch den „magischen Winkel“ entstehen flache Bereiche in dieser Bandstruktur, sodass sich ein Teil der Ladungsträger frei bewegen kann. Allerdings ist die Herstellung solcher exakt verdrehten Doppellagen viel zu aufwändig für die Massenproduktion.

Ein Team am HZB um Prof. Dr. Oliver Rader und Dr. Andrei Varykhalov hat an BESSY II gezeigt, dass es eine deutlich einfachere Möglichkeit gibt, um flache Bereiche in der Bandstruktur von Graphen zu erzeugen. Die Proben hatte Prof. Dr. Thomas Seyller, TU Chemnitz, mit einem Verfahren hergestellt, das auch für die Produktion größerer Flächen geeignet

ist: Ein Siliziumkarbidkristall wird erhitzt, bis Siliziumatome von der Oberfläche verdunsten. Die verbliebenen Kohlenstoffatome bilden zunächst eine Lage Graphen auf der Oberfläche und dann eine zweite Lage Graphen. Die beiden Graphen-Schichten liegen dabei genau übereinander.

Erst die hohe Auflösung bringt Klarheit

Mit Hilfe von winkelaufgelöster Photoemissionsspektroskopie (ARPES) lässt sich die Bandstruktur in Materialien mit extrem hoher Präzision ausmessen. Dabei fand das Team in den Graphen-Proben einen flachen Bereich in der Bandstruktur an einer überraschenden Stelle. „Bisher wurde die Graphen-Doppellage vor allem untersucht, weil sie eine Bandlücke aufweist, die sie zu einem Halbleitermaterial macht“, erklärt Varykhalov. „Erst mit der hohen Auflösung, die das ARPES-Instrument liefert, können wir diese Bandlücke genauer vermessen.“

„Diesen Bereich hatte bislang niemand so genau untersucht“, erklärt Erstautor Dr. Dmitry Marchenko: „Daher wurde bisher übersehen, dass es an dieser Stelle der Bandstruktur von Graphen einen flachen Bereich gibt.“ Dieser flache Bereich ermöglicht eine bestimmte Form der Supraleitung: Denn damit können sich Ladungsträger (Elektronen) in diesem Bereich völlig frei bewegen. Allerdings nur, wenn sich der flache Bereich genau in Höhe der Fermi-Energie befindet. Beim zweischichtigen Graphen liegt das Energieniveau des flachen Bereichs nur 200 Milli-Elektronenvolt unter der Fermi-Energie. Es ist jedoch möglich, dieses Energieniveau auf die Fermi-Energie zu erhöhen, entweder durch Dotierung mit Fremdatomen oder durch Anlegen einer externen Gate-Spannung. Die Physiker haben festgestellt, dass Wechselwirkungen zwischen den Graphen-Schichten sowie zwischen Graphen und Siliziumkarbid-Gitter für die Ausbildung des Flachbandbereichs verantwortlich sind. „Wir können dieses Verhalten mit sehr wenigen Parametern vorhersagen und diesen Mechanismus nutzen, um die Bandstruktur gezielt zu beeinflussen“, ergänzt Rader. arö

Science Advances, 2018 (DOI: 10.1126/sciadv.aau0059): Extremely Flat Band in Bilayer Graphene; D. Marchenko et. al.

BLAUER PHOSPHOR – ERSTMALS VERMESSEN UND KARTIERT

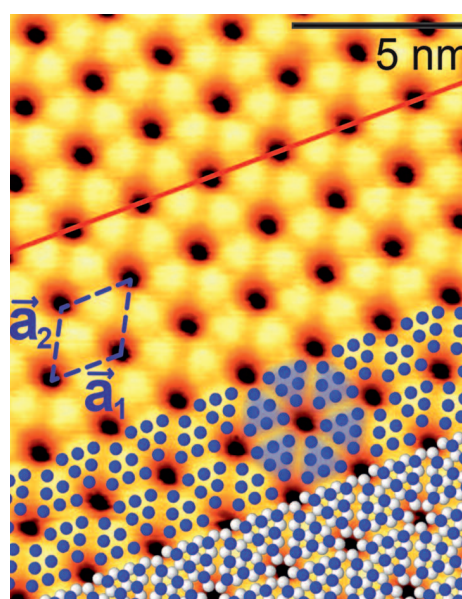
Die Existenz von „blauem“ Phosphor war bis vor kurzem reine Theorie: Nun konnte ein HZB-Team erstmals **Proben aus blauem Phosphor an BESSY II** untersuchen. Diese exotische Phosphor-Modifikation ist ein interessanter Kandidat für neue optoelektronische Bauelemente.

Das Element Phosphor tritt in vielerlei Gestalt auf und wechselt mit jeder neuen Modifikation auch den Katalog seiner Eigenschaften. Bisher bekannt waren roter, violetter, weißer und schwarzer Phosphor. Während einige Phosphorverbindungen sogar lebenswichtig sind, ist weißer Phosphor giftig und leicht entzündlich, während schwarzer Phosphor ganz im Gegenteil besonders stabil ist. Doch nun ist eine weitere Modifikation identifiziert: 2014 hat ein Team der Michigan State University, USA, durch Modellierungen herausgefunden, dass auch „blauer Phosphor“ stabil sein sollte. In dieser Modifikation vernetzen sich die Phosphor-Atome ähnlich wie beim Graphen zu einer Art Bienenwabenstruktur, die jedoch nicht perfekt flach ist, sondern regelmäßige „Buckel“ hat. Modellrechnungen zeigen, dass diese Phosphor-Modifikation kein Halbleiter mit einer schmalen Energielücke ist, sondern eine verhältnismäßig große Bandlücke von zwei Elektronenvolt aufweisen sollte. Das wäre etwa der siebenfache Wert des schwarzen Phosphors im Volumen und hochinteressant für optoelektronische Anwendungen.

Bandstruktur durch Gold-Substrat beeinflusst

2016 gelang es, blauen Phosphor durch Aufdampfen auf einer Goldoberfläche abzuscheiden. Doch erst jetzt gibt es die Gewissheit, dass es sich dabei tatsächlich um blauen Phosphor handelt. Dafür hat ein Team vom HZB um Dr. Evangelos Golias an BESSY II erstmals die elektronische Bandstruktur solcher Proben vermessen. Sie konnten die Energieverteilung der äußeren gebundenen Elektronen im Valenzband mit der Methode der winkelaufgelösten Photoemissionsspektroskopie abtasten und damit eine untere Grenze für den Wert der Bandlücke von blauem Phosphor angeben.

Dabei fanden sie heraus, dass sich die Phosphor-Atome nicht ganz unabhängig vom Gold-Substrat anordnen. Vielmehr versuchen sie sich an die Abstände zwischen den Gold-Atomen anzupassen. Dies verzerrt das gewellte Wabengitter, was sich wiederum auf die Energieverteilung der Elektronen auswirkt. So stimmt die Oberkante des Valenzbands, wo die Bandlücke beginnt, mit der theoretischen Vorhersage überein, ist jedoch etwas verschoben.

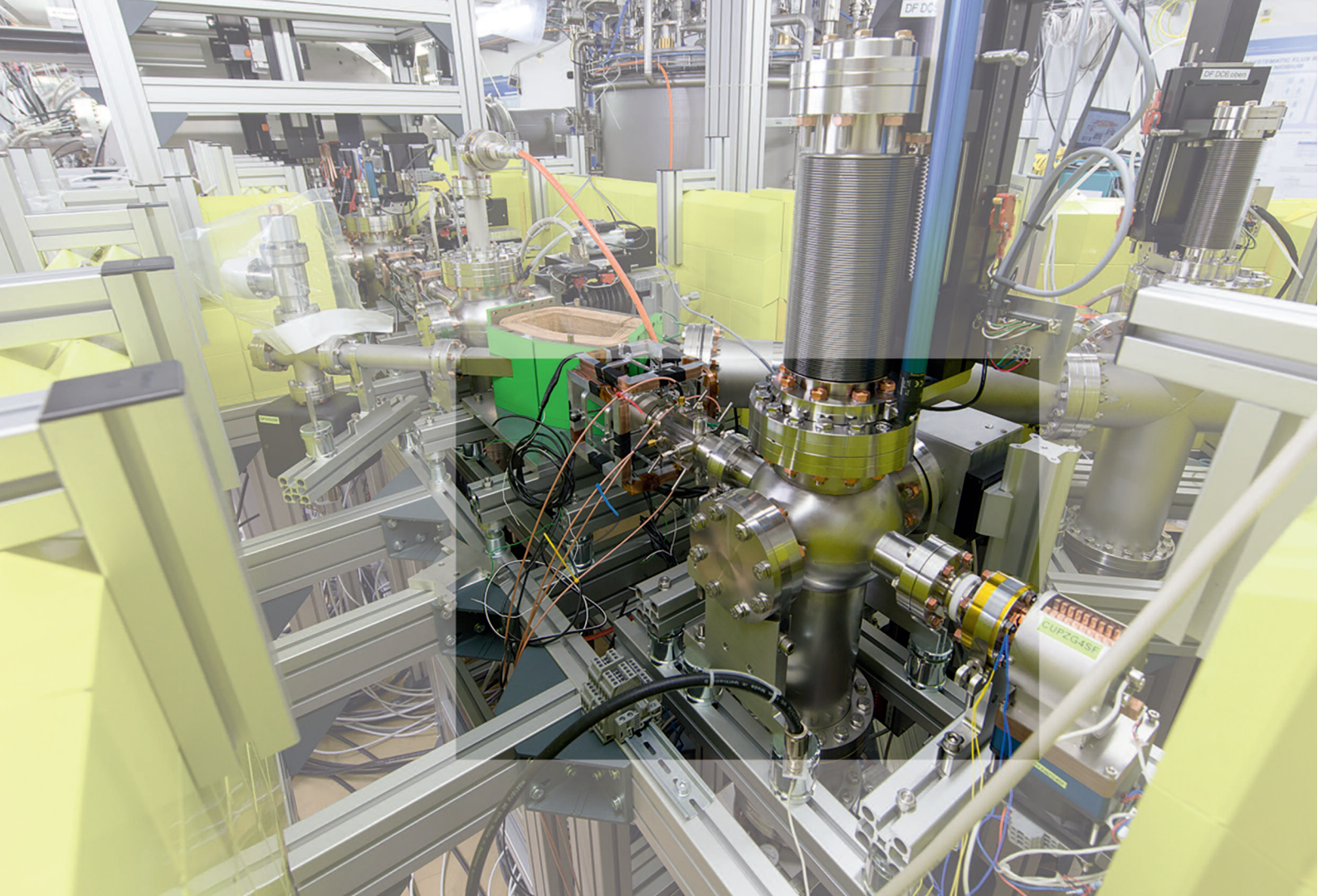


Die Rastertunnelmikroskop-Aufnahme zeigt blauen Phosphor auf einem Gold-Substrat. Blau eingezeichnet sind die errechneten Positionen der leicht erhöhten Phosphor-Atome, weiß die der tiefer liegenden. Dabei zeigen sich Gruppen aus sechs erhöhten Phosphor-Atomen als Dreiecke.

„Bisher hat man vor allem schwarzem Phosphor benutzt, um davon einzelne Atomlagen abzutragen“, erklärt Prof. Dr. Oliver Rader, der die HZB-Abteilung „Materialien für grüne Spintronik“ leitet. „Diese einzelnen Atomlagen weisen ebenfalls eine große Bandlücke auf, besitzen aber nicht die Bienenwabenstruktur des blauen Phosphors und können vor allem nicht direkt auf einem Substrat hergestellt werden. Unsere Ergebnisse offenbaren nicht nur die Materialeigenschaften dieser neuartigen zweidimensionalen Modifikation des Phosphors, sondern zeigen auch, wie das Substrat das Verhalten der Elektronen im blauen Phosphor beeinflusst. Und das ist ein wichtiger Faktor für jegliche optoelektronische Anwendung.“

arö

Nano Letters 2018, 18, 11, 6672-6678 (DOI: 10.1021/acs.nanolett.8b01305): Band renormalization of blue phosphorus on Au(111); E. Golias, M. Krivenkov, A. Varykhalov, J. Sanchez-Barriga and O. Rader



METHODENENTWICKLUNG FÜR DIE FORSCHUNG AN HZB-GROSSGERÄTEN

An der **EDDI-Beamline an BESSY II** hat ein HZB-Team um Dr. Francisco Garcia-Moreno einen raffinierten Präzisions-Drehtisch entwickelt und mit einer besonderen, schnellen Optik kombiniert. Damit konnten die Forscher die Porenbildung in Metall-Körnern während des Aufschäumens mit 25 Tomographien pro Sekunde dokumentieren – ein neuer Weltrekord für 3D-Tomographien. Die Porenbildung in Granulaten ist eine praxisrelevante Frage, denn sie könnten beim Aufschäumen komplizierte Formen besser ausfüllen als Schäume, die aus einem Metallblock entstehen. Für die Belastbarkeit des Formteils kommt es dabei auf eine enge Verbindung der Körner an (*Journal of Synchrotron Radiation*, 2018; DOI: 10.1107/S1600577518008949).

Einen umfassenden Beitrag über **bildgebende Verfahren mit Neutronen** hat ein Team am HZB und der Europäischen Spallationsquelle ESS publiziert. Die Autoren berichten über die neuesten Entwicklungen in der Neutronentomographie und zeigen die Einsatzmöglichkeiten dieser Methode an einer Reihe von Beispielen auf. Neutronen dringen tief ins Innere der Probe ein, ohne sie dabei zu zerstören. Darüber hinaus unterscheiden Neutronen auch leichte Elemente wie Wasserstoff oder Lithium voneinander. Neutronentomographien haben große Fortschritte in der Zahnmedizin, Kunstgeschichte, Pflanzenphysiologie, Paläobiologie, Batterieforschung oder Werkstoffanalyse ermöglicht (*Materials Today*, 2018; DOI: 10.1016/j.mattod.2018.03.001).

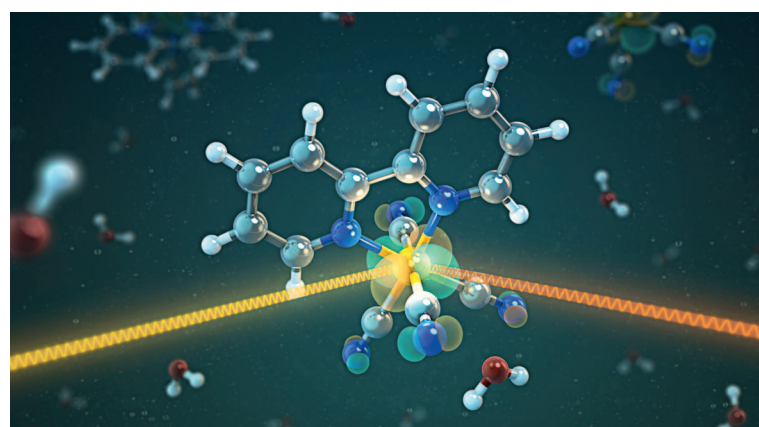
ÜBERGANGSMETALLKOMPLEXE: GEMISCHT GEHT'S BESSER

Ein Team hat an BESSY II untersucht, wie unterschiedliche Eisenkomplex-Verbindungen Energie aus eingestrahltm Licht verarbeiten. Dabei konnten sie zeigen, warum bestimmte Verbindungen das Potenzial haben, **Licht in elektrische Energie** umzuwandeln. Die Ergebnisse sind für die Entwicklung von organischen Solarzellen interessant.

Übergangsmetall-Komplexe – das ist ein sperriges Wort für eine Klasse von Molekülen mit interessanten Eigenschaften. Im Zentrum sitzt ein Element aus der Gruppe der Übergangsmetalle. Die äußeren Elektronen des Übergangsmetalls befinden sich auf keulenartig ausgedehnten d-Orbitalen, die sich durch äußere Anregung gut beeinflussen lassen. Manche Übergangsmetall-Komplexe beschleunigen als Katalysatoren bestimmte chemische Reaktionen, andere können sogar Sonnenlicht in Strom umwandeln: So basiert die bekannte Farbstoff-Solarzelle, die Michael Graetzel (EPFL) in den 1990er-Jahren entwickelt hat, auf einem Ruthenium-Komplex. Allerdings ist es bisher nicht gelungen, das seltene und teure Übergangsmetall Ruthenium durch ein preiswerteres Element zu ersetzen, zum Beispiel durch Eisen. Das ist erstaunlich, denn auch beim Eisen befindet sich die gleiche Anzahl an Elektronen auf den äußeren weit ausgedehnten d-Orbitalen. Die Anregung mit Licht im sichtbaren Bereich führt jedoch in den meisten bisher untersuchten Eisen-Komplexverbindungen nicht zur Freisetzung von langlebigen Ladungsträgern.

Inelastische Röntgenstreuung an BESSY II

Diese Frage hat nun ein Team an BESSY II genauer untersucht. Die Gruppe um Prof. Dr. Alexander Föhlisch hat dafür systematisch unterschiedliche Eisen-Komplexverbindungen in Lösung mit weichem Röntgenlicht bestrahlt. Dabei konnten die Forscher messen, wie viel Energie dieses Lichts von den Molekülen absorbiert wurde (Methode der inelastischen Röntgenstreuung, RIXS). Sie untersuchten Komplexe, in denen das Eisenatom entweder von Bipyridin-Molekülen oder Cyan-Gruppen (CN) umgeben waren, sowie Mischformen, in denen das Eisenzentrum mit je einem Bipyridin-Molekül und vier Cyan-Gruppen verbunden ist. Zwei Wochen lang wechselten sich die Teammitglieder im Schichtbetrieb ab, um die nötigen Messdaten zu erhalten. Die Messungen zeigten, dass die bisher kaum untersuchten Mischformen besonders interessant sind: Wenn Eisen nur von drei Bipyridin-Molekülen oder sechs Cyan-Gruppen (CN) umgeben ist, dann sorgt eine optische Anregung nur



Die Illustration zeigt eine Verbindung, in deren Zentrum ein Eisen-Atom sitzt. Es ist von vier CN-Gruppen und einem Bipyridin-Molekül umgeben. Das höchste besetzte Eisenorbital ist als grün-rote Wolke dargestellt. Sobald eine Cyangruppe da ist, beobachtet man, wie sich die äußeren Eisenorbitale delokalisieren, so dass auch um die Stickstoffatome Elektronen dicht vorhanden sind.

für eine kurzzeitige oder gar keine Freisetzung von Ladungsträgern. Das ändert sich erst, wenn man zwei der Cyan-Gruppen durch ein Bipyridin-Molekül ersetzt. „Dann sehen wir durch die Anregung mit weichem Röntgenlicht, wie 3d-Orbitale vom Eisen delokalisieren und sich bei den Cyangruppen verorten können, während gleichzeitig das Bipyridin-Molekül den Ladungsträger aufnimmt“, erklärt Raphael Jay, Erstautor der Studie, der über das Thema promoviert.

Die Ergebnisse zeigen, dass sich auch preiswerte Übergangsmetallkomplexe für den Einsatz in Solarzellen eignen könnten – sofern man sie mit passenden Molekülgruppen umgibt. Hier gibt es also noch ein reiches Feld für die Entwicklung neuer Materialien. *arö*

Physical Chemistry Chemical Physics, 2018 (DOI: 10.1039/c8cp04341h): The nature of frontier orbitals under systematic ligand exchange in (pseudo-)octahedral Fe(II) complexes; R. M. Jay, S. Eckert, M. Fondell, P. S. Miedema, J. Norell, A. Pietzsch, W. Quevedo, J. Niskanen, K. Kunus and A. Föhlisch

ELEKTRONISCHE PROZESSE WÄHREND DER KATALYSE BEOBACHTET

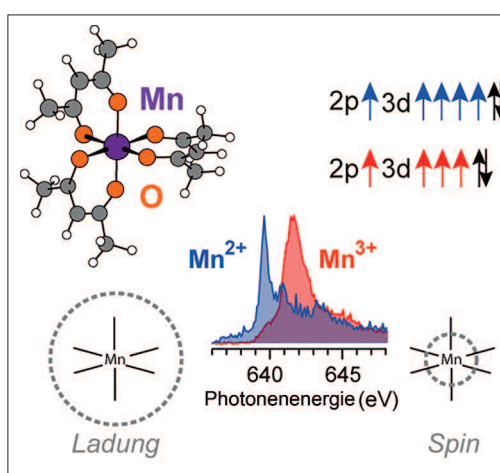
Ein internationales Team konnte an BESSY II erstmals elektronische Prozesse an einem Übergangsmetall im Detail untersuchen und aus den Messdaten zuverlässige Rückschlüsse auf deren katalytische Wirkung ziehen. Damit könnten gezielt **katalytische Systeme für künftige Anwendungen** entwickelt werden.

Viele wichtige Prozesse in der Natur benötigen Katalysatoren: Atome oder Moleküle, die die gewünschte Reaktion ermöglichen, aber selbst unverändert aus ihr hervorgehen. Ein Beispiel ist die Photosynthese in Pflanzen, die nur mit Hilfe eines Proteinkomplexes möglich ist, in dessen Zentrum vier Mangan-Atome sitzen. Oft spielen in solchen Prozessen sogenannte Redoxreaktionen eine entscheidende Rolle, bei denen die Reaktionsteilnehmer Elektronen austauschen und dabei reduziert (Elektronenaufnahme) beziehungsweise oxidiert (Elektronenabgabe) werden. Katalytische Redoxprozesse in der Natur oder in der Technik gelingen oft nur dank passender Katalysatoren, in denen Übergangsmetalle eine wichtige Funktion übernehmen.

Solche Übergangsmetalle und insbesondere ihr Redox- oder Oxidationszustand lassen sich besonders gut mit weichem Röntgenlicht untersuchen. Bei der sogenannten L-Kanten-Absorptionsspektroskopie werden Elektronen aus der 2p-Schale des Übergangsmetalls angeregt, kurzfristig freie d-Orbitale zu besetzen. Aus dem Röntgen-Absorptionsspektrum lässt sich eine Energiedifferenz ermitteln, von der bekannt ist, dass sie den Oxidationszustand des Moleküls oder des Katalysators widerspiegelt. Wo genau im Katalysator während einer Redoxreaktion die Elektronen jedoch aufgenommen oder abgegeben werden, wie genau also sich die Ladungsdichte im Katalysator bei einer Änderung seines Oxidationszustandes verändert, war bisher weitgehend unbekannt. Dies lag vor allem daran, dass zuverlässige Methoden zur theoretischen Beschreibungen der Ladungsdichten in Katalysator-Molekülen fehlten und dass experimentelle Daten nur schwer zu erhalten sind.

Unterschiedliche Oxidationszustände untersucht

Erstmals ist es nun einem internationalen Team des HZB, der Uppsala University, des Lawrence Berkeley National Laboratory in Berkeley, der Manchester University und des SLAC National Accelerator Laboratory in Stanford mit Messungen an BESSY II gelungen, Mangan-Atome in unterschiedlichen Verbindungen und Oxidationszuständen in



Auch bei der Photosynthese spielen Mangan-Verbindungen als Katalysatoren eine Rolle.

operando – also während verschiedener Oxidationsstufen – zu untersuchen. Die Forscher um Dr. Philippe Wernet brachten dafür die Proben in unterschiedliche Lösungsmittel ein, untersuchten den Flüssigkeitsstrahl im brillanten Röntgenlicht und verglichen die Messdaten mit Rechnungen aus der Arbeitsgruppe um Marcus Lundberg von der Uppsala University.

„Wir haben einen neuartigen experimentellen Aufbau mit quantenchemischen Modellrechnungen kombiniert und dadurch, wie wir meinen, einen Durchbruch für das Verständnis von metallorganischen Katalysatoren erreicht“, sagt Wernet: „Erstmals konnten wir Berechnungen zu Oxidation oder Reduktion, die nicht lokal auf dem Metall, sondern auf dem gesamten Molekül stattfinden, auch im Experiment testen und nachvollziehen.“ Diese Erkenntnisse sind ein wichtiger Grundstein für zukünftige Arbeiten an komplexeren Systemen. *arö*

Angew. Chem. Int. Ed. 2017, Vol. 56, Issue 22, 6088-609 (DOI: 10.1002/anie.201700239): Ultrafast Independent N-H and N-C Bond Deformation Investigated with Resonant Inelastic X-ray Scattering; S. Eckert, J. Norell, P. S. Miedema, M. Beye, M. Fondell, W. Quevedo, B. Kennedy, M. Hantschmann, A. Pietzsch, B. Van Kuiken, M. Ross, M. P. Minitti, S. P. Moeller, W. F. Schlotter, M. Khalil, M. Odelius and A. Föhlisch

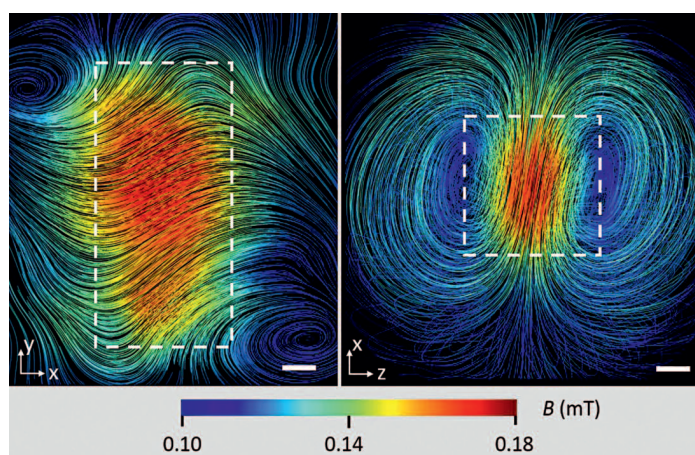
NEUTRONEN TASTEN MAGNETFELDER IM INNEREN VON PROBEN AB

Mit Hilfe einer neu entwickelten Neutronen-Tomographie-Methode hat ein HZB-Team erstmals den Verlauf von magnetischen Feldlinien im Inneren von Materialien abbilden können. Die „**Tensorielle Neutronen-Tomographie**“ verspricht neue Einblicke in Supraleiter, Batterie-Elektroden und andere Energiematerialien.

Magnetische Felder im Inneren von Proben zu messen, gelingt bislang nur auf indirekte Weise. Mit Licht, Röntgenstrahlung oder Elektronen lassen sich zwar magnetische Orientierungen abtasten, allerdings nur auf den Oberflächen von Materialien. Neutronen dagegen dringen tief in die Probe ein und können – dank ihrer eigenen magnetischen Eigenschaften – präzise Aufschluss über magnetische Felder im Inneren geben. Allerdings ließen sich bislang nur grob die unterschiedlich ausgerichteten magnetischen Domänen mithilfe von Neutronen kartieren, nicht aber die Vektorfelder, also Richtungen und Stärken des Magnetfelds im Inneren der Probe. Nun hat ein Team um Dr. Nikolay Kardjilov und Dr. Ingo Manke am HZB eine neue Methode entwickelt, um die Magnetfeldlinien im Inneren von massiven, dicken Proben zu vermessen: Für die Tensorielle Neutronen-Tomographie setzen sie Spin-Flipper und -Polarisatoren ein, die dafür sorgen, dass nur Neutronen mit gleichgerichteten Spins die Probe durchdringen. Treffen solche spinpolarisierten Neutronen auf ein magnetisches Feld im Inneren, regt dieses die Neutronenspins zur Präzession an, sodass sich die Spin-Polarisationsrichtung verändert, was Rückschlüsse auf die Feldlinien erlaubt.

Berechnung mit TMART-Algorithmus

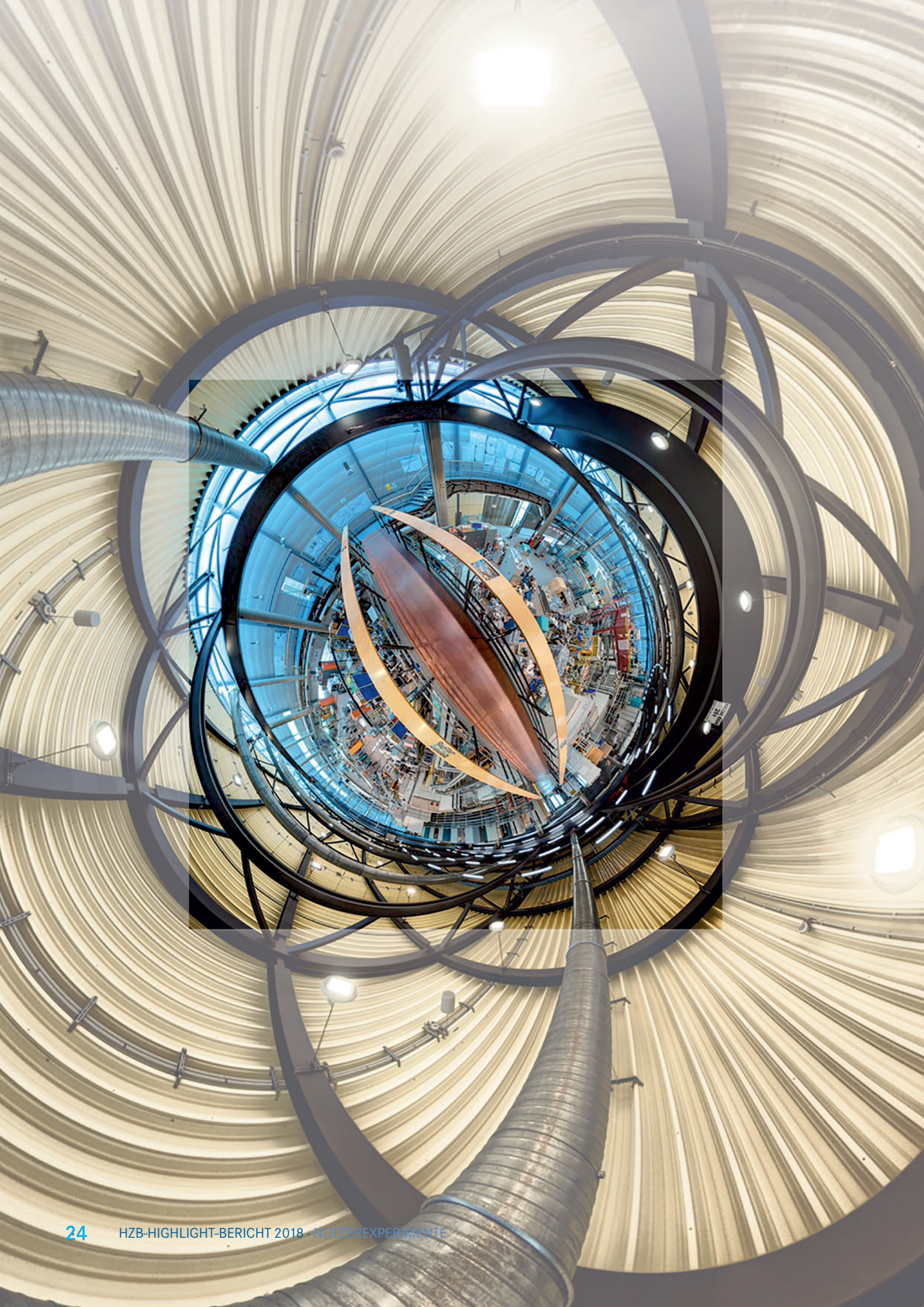
Mit der neu entwickelten Experimentiermethode lässt sich aus neun einzelnen Tomographien mit jeweils unterschiedlichen Neutronenspin-Einstellungen eine dreidimensionale Abbildung des Magnetfelds im Inneren der Probe berechnen. Hierzu wird ein von Dr. André Hilger am HZB neu entwickelter, äußerst komplexer mathematischer Tensor-Algorithmus eingesetzt, der „TMART“ getauft wurde. Mit ihm konnten die Experten erstmals das komplexe Magnetfeld im Kern von supraleitendem Blei kartieren. Die Probe aus massivem, polykristallinen Blei wurde auf vier Kelvin abgekühlt (Blei wird supraleitend unterhalb von sieben Kelvin) und einem Magnetfeld von 0,5 Millitesla ausgesetzt. Dabei wird das Magnetfeld zwar aufgrund des Meissner-Effekts aus dem Probenkern verdrängt, dennoch bleiben magnetische Flusslinien an den (nicht-supraleitenden) Korngrenzen der polykristallinen Probe haften. Diese Flusslinien verschwinden auch nach



Die Bilder zeigen den Verlauf der magnetischen Feldlinien im Inneren eines supraleitenden Blei-Quaders in zwei verschiedenen Schnittebenen (gestrichelter Umriss der Bleiprobe). Der Skalenstrich entspricht fünf Millimeter.

dem Abschalten des äußeren Felds nicht, weil sie zuvor in der Mitte der supraleitenden Kristallkörner Ströme induziert haben, die diese Felder nun aufrechterhalten. „Zum ersten Mal können wir im Inneren eines massiven Materials das magnetische Vektor-Feld in seiner ganzen Komplexität dreidimensional sichtbar machen“ sagt HZB-Physiker Manke. „Mit Neutronen können gleichzeitig massive Materialien durchdrungen und Magnetfelder nachgewiesen werden. Es gibt zurzeit keine andere Methode, die das ermöglicht.“ Die Methode ist zerstörungsfrei und erreicht Auflösungen bis in den Mikrometerbereich. Die Einsatzbereiche sind sehr vielfältig. Sie reichen von der Kartierung von magnetischen Feldern in Supraleitern und der Beobachtung von magnetischen Phasenübergängen bis zur Materialanalyse: So lassen sich Feldverteilungen in Elektromotoren und metallischen Komponenten abbilden und Stromflüsse in Batterien und Brennstoffzellen mit dieser Methode visualisieren. arö

Nature Communications, 2018 (DOI: 10.1038/s41467-018-06593-4): Tensorial Neutron Tomography of Three-Dimensional Magnetic Vector Fields in Bulk Materials; A. Hilger et. al.



NUTZEREXPERIMENTE

An der **Neutronenquelle BER II** hat ein Team der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) die Eigenspannungen von Schweißnähten aus ferromagnetischem Stahl analysiert. Neutronenmessungen sind nach wie vor das bevorzugte Verfahren, um vorhandene Eigenspannungen tief im Inneren von Materialien exakt zu ermitteln. Hohe Unterschiede in Eigenspannungen sind für ein Material gleichbedeutend mit großem „Stress“, unter denen es sogar reißen kann. Die Forscher untersuchten dafür zunächst die sehr schwachen Magnetfelder von Schweißnähten aus einem ferromagnetischen Stahl. Mit Hilfe von speziellen Magnetfeldsensoren gelang dies mit hoher Empfindlichkeit und mit einer Ortsauflösung im Zehntel-Mikrometerbereich. Im Anschluss identifizierten die Forscher die unterschiedlichen Materialeigenheiten der Schweißnähte. Dank der Ergebnisse rückt die Vision näher, mithilfe von Magnetfeldsensoren relevante Materialveränderungen bereits frühzeitig zu erkennen, bevor ein Riss überhaupt entsteht – und zwar preiswert und zerstörungsfrei (*Journal of Nondestructive Evaluation*, DOI: 10.1007/s10921-018-0522-0).

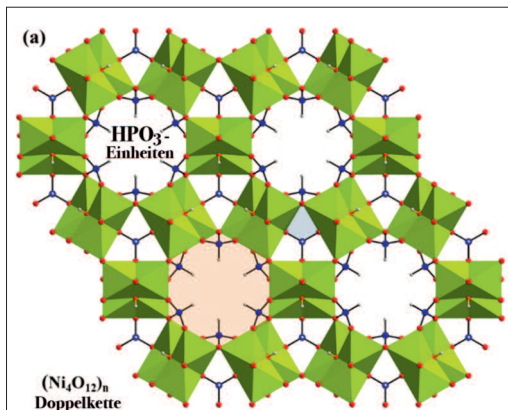
Mithilfe von **Experimenten mit kurzen Röntgenpulsen** hat ein Forscherteam aus dem HZB und der Universität Potsdam den Wärmetransport in einem Modellsystem aus nanometerdünnen metallischen und magnetischen Schichten untersucht. Ähnliche Systeme sind Kandidaten für künftige hocheffiziente Datenspeicher, die durch Laserpulse lokal erhitzt und neu beschrieben werden können (Heat-Assisted Magnetic Recording). Durch die Experimente fanden die Wissenschaftler heraus, dass sich die Wärme in dem untersuchten Modellsystem aus Gold und Nickel hundert Mal langsamer als erwartet verteilt. „Wir haben mit diesem Versuchsaufbau zeigen können, dass es sich lohnt, solche Transportprozesse zeitaufgelöst zu analysieren“, sagt Prof. Dr. Matias Bargheer von der Universität Potsdam, der am HZB eine gemeinsame Forschungsgruppe zu ultraschneller Dynamik leitet. Mit einem vertieften Verständnis der Transportvorgänge könnten Wissenschaftler wärmegestützte magnetische Speicher so entwickeln, dass sie mit minimaler Energie auskommen (*Nature Communications* 9, 2018, 3335 (DOI: 10.1038/s41467-018-05693-5)).

EIN SUPERKATALYSATOR FÜR DIE ELEKTROLYSE

Wissenschaftler aus Berlin haben einen **neuartigen Kristall aus Nickel und Phosphor** geschaffen. Untersuchungen an BESSY II belegen: Seine außergewöhnlichen Eigenschaften machen den Werkstoff zu einem guten Katalysator für die elektrochemische Herstellung von Wasserstoff.

Um Wasserstoff durch die elektrochemische Spaltung von Wasser zu gewinnen, sind hochaktive Katalysatoren erforderlich. „Bislang nutzt man dafür meist Edelmetalle“, sagt Prof. Dr. Holger Dau, Leiter der Arbeitsgruppe Biophysik und Photosynthese an der Freien Universität Berlin. So wird an der Kathode, wo sich der Wasserstoff bildet, häufig Platin eingesetzt. An der Anode, wo als zweites Produkt der Elektrolyse Sauerstoff entsteht, wirken Indium oder Ruthenium als Reaktionsbeschleuniger. Was die jeweili-

Die Nickel-Sauerstoff-Oktaeder (grün) sind über Sauerstoffatome (rot) mit Phosphor-Atomen (blau) verknüpft, sodass sich sechseckige Kanäle ausbilden.



gen Metalle auszeichnet, erkennen Physiker und Elektrochemiker am sogenannten Überpotenzial: Das ist die Menge an Energie, die – zusätzlich zur mindestens aufzuwendenden chemischen Bindungsenergie – erforderlich ist, um Wasser in seine elementaren Bestandteile zu trennen. „Ist das Überpotenzial groß, ist der Prozess nicht effizient“, sagt Dau. Dann geht viel Energie ungenutzt verloren. Etliche Edelmetalle zeichnen sich dagegen durch ein kleines Überpotenzial aus – das macht sie als Helfer bei der Elektrolyse gefragt. Allerdings: „Die Elemente sind selten und teuer“, stellt Dau fest. „Damit ist eine Wasserstoff-Herstellung in großem Maßstab nicht möglich.“

Daher suchen Forscher nach alternativen Stoffen, die ähnlich günstige Eigenschaften haben wie Platin und Co. Ein interdisziplinäres Team von Freier Universität und Technischer Universität Berlin, dem auch Holger Dau angehört, ist nun fündig geworden: Die Wissenschaftler haben ein neuartiges

kristallines Material erzeugt, das gleich mit mehreren vorteilhaften Eigenschaften glänzt – und die teuren Edelmetalle teils noch übertrifft. Die Verbindung auf Basis von Nickel und Phosphor hat nicht nur eine hohe energetische Effizienz. Sie ist auch sehr stabil. „Das ermöglicht einen langen Betrieb in der Elektrolyse, ohne den Katalysator tauschen zu müssen“, sagt Dau. Im Gegensatz zu vielen anderen Materialien verändert sich das Gefüge des Werkstoffs, bei dem Phosphit-Ionen im Kristallgitter des Nickels integriert sind, im Lauf der Zeit nicht. Es ist von Anfang an katalytisch aktiv und es wirkt – anders als Edelmetalle – bifunktionell, das heißt an der Kathode und der Anode.

Dem optimalen Katalysator auf der Spur

Um herauszufinden, wie sich die nützlichen Merkmale der Nickel-Phosphit-Verbindung erklären lassen, untersuchten die Forscher das Material mit Röntgenspektroskopie an BESSY II. „Die Messungen belegen eine ungewöhnliche Struktur“, berichtet Dau. „In der Mitte jeder achtförmigen Kristalleinheit sitzt ein Nickel-Atom, an den Seiten befinden sich Sauerstoff-Atome.“ Dazwischen, so die Vermutung, formen sich Kanäle, durch die sich Protonen – die Atomkerne des Wasserstoffs – besonders gut bewegen können. Den Werkstoff haben Forscher der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Matthias Driess am Institut für Chemie, Metallorganik und anorganische Materialien der TU Berlin entwickelt. Angespornt durch die vielversprechenden Resultate mit Nickel-Phosphit haben sie zusammen mit den Physikern um Holger Dau inzwischen weitere Werkstoffe geschaffen – mit ähnlich ungewöhnlicher Kristallstruktur und noch günstigeren Eigenschaften. Das Ziel: „Wir wollen die Katalysatoren noch besser verstehen und eine für die Gewinnung des alternativen Brennstoffs Wasserstoff aus einfachem Wasser optimale Verbindung finden“, sagt Dau. Damit könnten die Forscher der Energiewende einen kräftigen Schub geben. *rb*

Energy Environ. Sci., 2018, 11, 1287–1298 (DOI: 10.1039/C7EE03619A): A structurally versatile nickel phosphite acting as a robust bifunctional electrocatalyst for overall water splitting; P. W. Menezes, C. Panda, S. Loos, F. Bunschei-Bruns, C. Walter, M. Schwarze, X. Deng, H. Dau and M. Driess

NANOSTRUKTURIERUNG ERHÖHT DIE EFFIZIENZ VON METALL-FREIEN PHOTOKATALYSATOREN

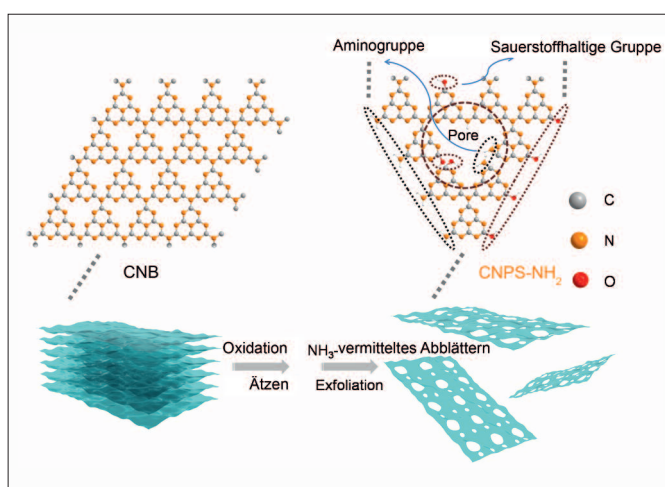
Ein Team der Tianjin-University hat mit einer Gruppe am HZB gezeigt, dass es mit einem einfachen Prozess möglich ist, die **katalytische Wirkung von polymeren Kohlenstoffnitriden** erheblich zu steigern. Damit könnten diese günstigen, metallfreien Materialien zur Produktion von solarem Wasserstoff genutzt werden.

Eine der großen Herausforderungen der Energiewende ist es, auch dann Energie zu liefern, wenn die Sonne nicht scheint. Ein Lösungsansatz ist die Wasserstoffproduktion mithilfe von Sonnenlicht durch die Aufspaltung von Wasser in Wasserstoff und Sauerstoff. Wasserstoff ist ein guter Energiespeicher und vielseitig verwendbar. Allerdings funktioniert die Wasserspaltung nicht einfach von selbst: Damit Licht Wassermoleküle zerlegen kann, sind sogenannte Katalysatoren nötig. Einer der besten Katalysatoren ist Platin, ein seltenes und teures Edelmetall. Weltweit suchen Forschungsteams jedoch nach preisgünstigeren Alternativen. Ein Team um Prof. Bin Zhang von der chinesischen Tianjin-University hat gemeinsam mit dem Team um Dr. Tristan Petit vom HZB einen großen Fortschritt bei einer bekannten Klasse von günstigen und metallfreien Photokatalysatoren erreicht.

Das chinesische Team ist auf die Synthese von polymeren Kohlenstoffnitriden (PCN) spezialisiert, die als gute Katalysatorkandidaten für die Wasserstoffproduktion gelten. Dabei bilden die PCN-Moleküle miteinander eine Struktur, die sich mit rohem Blätterteig vergleichen lässt: Eng aneinander gepackt liegen die Blätter aufeinander. Durch eine verhältnismäßig unkomplizierte Wärmebehandlung in zwei Schritten ist es den chinesischen Chemikern nun gelungen, die einzelnen „Blätter“ voneinander zu lösen – so wie ein Blätterteig im Ofen in einzelne Lagen aufgeht. Nach der Wärmebehandlung erhielten die Chemiker Proben, die aus einzelnen Nanolagen mit großen Poren bestanden. In diese Poren konnten sie unterschiedliche Aminogruppen mit bestimmten Funktionalitäten einschleusen.

Einlagerung von Aminogruppen

Petit und sein Team untersuchten an BESSY II mit röntgenspektroskopischen Methoden eine Reihe dieser nanostrukturierten PCN-Proben. „Wir konnten bestimmen, welche Amino- und andere Molekülgruppen sich in den Poren ein-



Polymere Kohlenstoffnitride (PCN) lassen sich durch Wärmebehandlung in einzelne Nanolagen mit großen Poren trennen. In diese Poren konnten die Chemiker unterschiedliche Molekülgruppen einlagern.

gelagert hatten“, erklärt der Wissenschaftler Jian Ren, der einer der Erstautoren ist. Dabei konnten die Forscher auch analysieren, wie bestimmte Aminogruppen Elektronen geradezu an sich reißen, eine Eigenschaft, die bei der Aufspaltung von Wasser sehr hilfreich ist. Tatsächlich zeigten diese Proben, kombiniert mit Nickel als Ko-Katalysator, eine Rekorderffizienz, die elf Mal so hoch war wie bei normal strukturiertem PCN unter Sonnenlicht.

„Damit konnten wir belegen, dass PCN als Katalysator für die solare Wasserstoffproduktion interessant ist, denn die jetzt erreichten Effizienzen kommen an die von anorganischen Katalysatoren heran“, erklärt Petit, der als Freigeist-Fellow von der Volkswagenstiftung gefördert wird. „Außerdem zeigt diese Studie, wie sich mithilfe von Röntgenspektroskopie im weichen Röntgenbereich an BESSY II entschlüsseln lässt, welche Prozesse tatsächlich in diesen Photokatalysatoren ablaufen.“

red/arö

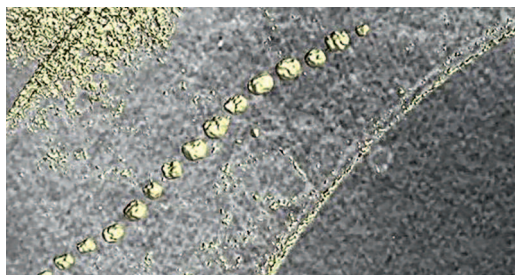
Energy & Environmental Science, 2018 (DOI: 10.1039/C7EE03592F): Engineering oxygen-containing and amino groups into two-dimensional atomically-thin porous polymeric carbon nitrogen for enhanced photocatalytic hydrogen production; N. Meng, J. Ren, Y. Liu, Y. Huang, T. Petit and B. Zhang

BAKTERIEN MIT MAGNETISCH EMPFINDLICHEM KOMPASS

Eine Kooperation aus spanischen Teams und einer Gruppe am HZB hat den inneren Kompass des **magnetotaktischen Bakteriums** *Magnetospirillum gryphiswaldense* an BESSY II untersucht. Die Ergebnisse können für die Entwicklung von biomedizinischen Anwendungen wie Nanorobotern und Nanosensoren nützlich sein.

Magnetotaktische Bakterien können mithilfe von magnetischen Nanopartikeln das Erdmagnetfeld „spüren“. Sie kommen in Gewässern und marinen Sedimenten vor. *Magnetospirillum gryphiswaldense* gehört zu den Spezies, die sich besonders einfach im Labor züchten lassen, und zwar wahlweise mit oder ohne magnetische Nanopartikel im Inneren der Zelle. „Diese Mikroorganismen sind ideale Testobjekte um zu verstehen, wie ihr innerer Kompass sich bildet“, erklärt Lourdes Marcano, Doktorandin an der Universidad del Pais Vasco im nordspanischen Leioa.

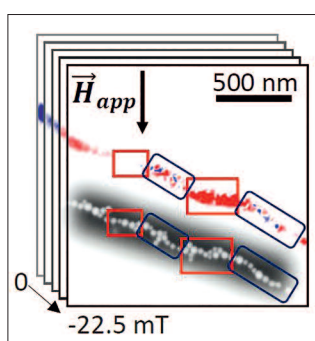
Die magnetischen Nanopartikel bilden im Inneren der Zelle eine Kette, wie die Elektronenkryotomographie zeigt.



Magnetospirillum-Zellen enthalten eine Anzahl von winzigen Magnetit-Teilchen (Fe_3O_4) mit Durchmessern um die 45 Nanometer. Diese Nanoteilchen, auch Magnetosome genannt, ordnen sich in der Regel zu einer Kette im Inneren des Bakteriums an. Diese Kette aus Magnetosomen wirkt als Kompassnadel und richtet sich nach einem äußeren Magnetfeld aus. Dadurch wird auch das Bakterium entlang des Erdmagnetfelds ausgerichtet. „Diese Bakterien existieren mit Vorliebe zwischen sauerstoffreichen und sauerstoffarmen Schichten“ sagt Marcano. „Ihr innerer Kompass könnte ihnen helfen, die optimalen Lebensbedingungen zu finden.“ Die spanischen Kooperationspartner untersuchten zunächst die Form der Magnetosomen und ihre Anordnung im Innern der Zelle mit unterschiedlichen Methoden, darunter auch der Elektronenkryotomographie.

Einzelne magnetische Ketten an BESSY II vermessen

An BESSY II untersuchten sie gemeinsam mit dem HZB-Team um Dr. Sergio Valencia isolierte Ketten aus Magneto-



Messungen an BESSY II zeigten, wie sich die Kettenglieder unter einem äußeren Magnetfeld ausrichten.

somen. Insbesondere wollten sie ermitteln, wie sich die Kette zum magnetischen Feld ausrichtet, das die magnetischen Nanopartikel selbst erzeugen. „Normalerweise benötigt man hunderte von Proben mit unterschiedlich orientierten Magnetosomen-Ketten, um die magnetischen Eigenschaften dieser Bakterien zu charakterisieren“,

sagt Valencia. „Aber an BESSY II können wir mithilfe von Photoelektronen-Emissionsmikroskopie (PEEM) und weiteren Methoden die magnetischen Eigenschaften von einzelnen Ketten präzise vermessen.“ Dies eröffnet die Möglichkeit, die Ergebnisse mit theoretischen Vorhersagen zu vergleichen.

Tatsächlich zeigten die Experimente etwas Überraschendes: Anders als bisher vermutet, ist das Magnetfeld der Magnetosomen nicht parallel zur Kette ausgerichtet, sondern leicht schräg dazu. Die theoretische Modellierung der spanischen Partner deutet darauf hin, dass dieser Neigungswinkel dazu führt, dass die Magnetosomenkette eine spiralförmige Form hat. Es sei sehr wichtig, die Mechanismen zu verstehen, die die Form der Kette beeinflussen, betonen die Wissenschaftler. Solche bewährten Erfindungen der Natur könnten als Vorbild und Inspiration dienen. So ließen sich möglicherweise ähnliche Mechanismen für biomedizinische Anwendungen nutzen – zum Beispiel zur Steuerung von Nanorobotern.

arö

Nanoscale, 2018 (DOI: 10.1039/C7NR08493E): Configuration of the magnetosome chain: a natural magnetic nanoarchitecture; I. Orue, L. Marcano, P. Bender, A. Garcia-Prieto, S. Valencia, M.A. Mawass, D. Gil-Carton, D. Alba Venero, D. Honecker, A. Garcia-Arribas, L. Fernandez Barquin, A. Muela, M.L. Fdez-Gubieda

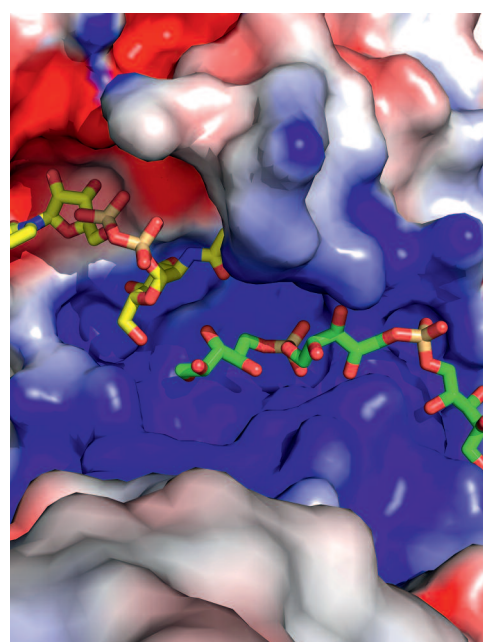
KLEINER TAUSCH MIT TÖDLICHER WIRKUNG

In vielen Krankenhäusern der Welt führen Ärzte einen oft aussichtslosen Kampf: Gegen Infektionen mit Bakterien wie *Staphylococcus aureus* wirken eine ganze Reihe von Antibiotika nicht mehr. Forscher haben mithilfe von BESSY II-Daten die **Ursache für die Antibiotika-Resistenz des Bakteriums** herausgefunden.

Methicillin-resistente Bakterien des Typs *Staphylococcus aureus* (kurz: MRSA-Bakterien) können Infektionen verursachen, die häufig tödlich enden. Wenn Prof. Dr. Thilo Stehle und Dr. Yinglan Guo von der Universität Tübingen gemeinsam mit ihren Kollegen mit Röntgenstruktur-Analysen an BESSY II winzige Details der Struktur der Zellwand dieser MRSA-Bakterien sichtbar machen, öffnen sie damit eine Tür, hinter der in einigen Jahren vielleicht doch eine Behandlungsmöglichkeit für diese hochgefährlichen Infektionen auftauchen könnte. Den Forschern war aufgefallen, dass ein erheblicher Teil der gefährlichen MRSA-Erreger selbst von sogenannten Bakteriophagen, also von auf Bakterien spezialisierten Viren, infiziert ist. „Wir nehmen diese Erreger mit der gesamten Bandbreite unserer Möglichkeiten unter die Lupe, von Untersuchungen an Mäusen bis hin zu Strukturanalysen mit den an BESSY II gewonnenen Daten, mit denen wir einzelne Atome aufspüren können“, erklärt Stehle. Besonders interessieren sich die Forscher dabei für die Zellwände der Bakterien. Diese bestehen aus vielen Schichten sehr großer Moleküle, die sich aus Zuckern und Aminosäuren zusammensetzen. Eingelagert in diese Schichten sind Proteine und Teichonsäuren. Letztere wiederum sind Ketten aus Zuckern und Phosphaten.

Immunabwehr ausgeschaltet

Diese Teichonsäuren versehen die Bakterien mithilfe des TarS-Enzyms an bestimmten Stellen mit einzelnen Zucker-Molekülen. Genau dieses Enzym ist in den MRSA-Erregern gegen das sehr ähnliche Enzym TarP der Bakteriophagen ausgetauscht. TarP macht auf den ersten Blick anscheinend nur eine Kleinigkeit anders: Während TarS die Zucker-Struktur an das vierte Kohlenstoff-Atom einer Kette in der Teichonsäure hängt, bugsiert TarP den Zucker an das dritte dieser Kohlenstoff-Atome. Welche dramatische Konsequenz diese Struktur-Veränderung hat, fand das Forscherteam heraus, als es Mäusen beide Teichonsäuren spritzte. Während das Immunsystem der Nagetiere die vom TarS-Enzym der Bakterien mit Zucker versehene Teichonsäure offensichtlich gut erkannte und größere Mengen von Antikörpern bildete,



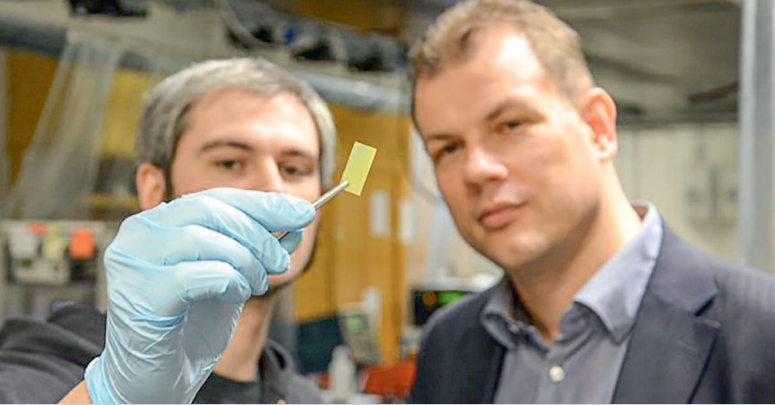
Im Modell sieht man, wie das TarP-Enzym eines spezialisierten Virus gerade einen Zucker (gelbrote Stäbchen) an eine Teichonsäure (grünrote) Stäbchen hängt. Dieser Vorgang, so die Annahme der Forscher, macht das Bakterium gegen Antibiotika resistent.

mit denen eine solche MRSA-Infektion gezielt bekämpft wird, fanden die Forscher nach Injektion der mit dem Bakteriophagen-TarP-Enzym verzuckerten Teichonsäure nur sehr geringe Mengen solcher Antikörper. „Offensichtlich entkommen diese Bakterien so also der Immunabwehr“, erklärt Stehle.

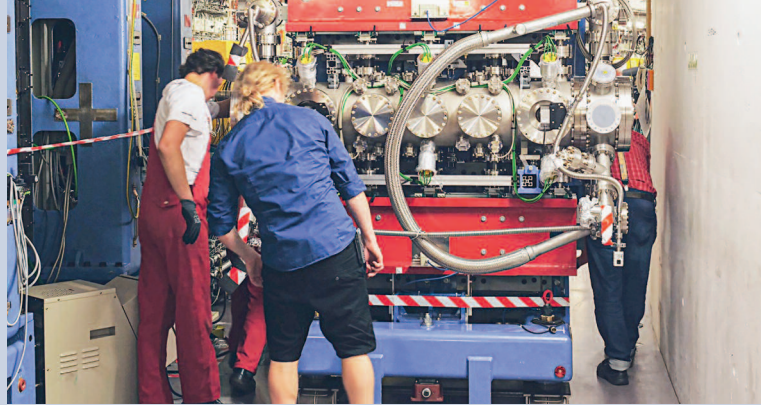
„Weshalb weniger Antikörper ausgebildet werden, untersuchen wir als nächstes“, sagt Stehle. Verstehen die Forscher diese Vorgänge, finden sie vielleicht auch Substanzen, die das TarP-Enzym der Bakteriophagen blockieren und damit das Schwächen der Immunabwehr verhindern. Damit könnte es möglich werden, den Organismus des Patienten gezielt zu unterstützen, damit er sich besser gegen gefährliche MRSA-Bakterien wehren kann.

rk

Nature, Vol. 563, 705–709, 2018 (DOI: 10.1038/s41586-018-0730-x): Methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* alters cell wall glycosylation to evade immunity; D. Gerlach et. al.



Prof. Dr. Roel van de Krol (re.), Leiter des HZB-Instituts für Solare Brennstoffe, und sein Team forschen nach Möglichkeiten, Solarenergie chemisch in Form von Wasserstoff und anderen Brennstoffen zu speichern.



Im September 2018 wurde der neue CPMU 17-Undulator in den Speicherring BESSY II eingebaut, um hochbrillante Röntgenstrahlung im tender X-Ray-Bereich für das EMIL-Labor bereitzustellen.

ZAHLEN UND FAKTEN AUS DEM HZB

23

Prozent Frauenanteil hatte das HZB beim 692 Mitarbeiter umfassenden wissenschaftlichen Personal zum Jahresende 2018. Gemessen an der Gesamtzahl der 1.169 Beschäftigten lag der Frauenanteil bei 30,5 Prozent.

557

ISI- oder SCOPUS-zitierte Publikationen wurden 2018 von den Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern am HZB veröffentlicht.

4.700

Besucher kamen zur „Langen Nacht der Wissenschaften“ zum HZB nach Adlershof, informierten sich über den Betrieb und die Forschung an BESSY II und diskutierten mit den Forscherinnen und Forschern über Solarenergie.

305

Kooperationen unterhielt das HZB Ende 2018 mit anderen wissenschaftlichen Einrichtungen – ein kräftiger Zuwachs gegenüber dem Vorjahr (252).

21

junge Studierende aus elf Ländern haben im Sommer 2018 acht Wochen lang im Rahmen des beliebten Sommerprogramms am HZB gearbeitet. Ihre Betreuung übernahmen wieder engagierte HZB-Forscherinnen und Forscher.

15.566

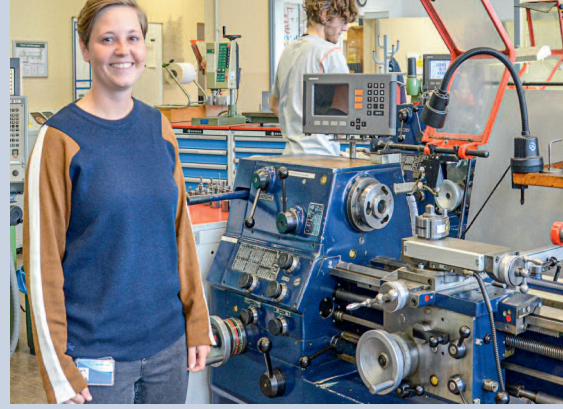
Schichten à acht Stunden standen den 2.241 Nutzerinnen und Nutzern aus 31 Ländern an den 27 BESSY II-Strahlrohren mit 36 Experimentierstationen zur Verfügung.

19,94

Millionen Euro an Drittmittelträgen erhielt das HZB im Jahr 2018. Darin enthalten sind circa 4,39 Millionen Euro aus Auftragsforschung, 3,92 Millionen Euro aus Leistungen an Dritte, circa 4,18 Millionen Euro Projektförderung des Bundes und etwa 2,35 Millionen Euro von der Europäischen Union.



Die Synchrotronquelle BESSY II wird im Rahmen der HZB-Strategie 2020+ zu einem Variablen Pulslängen-Speicherring (VSR) ausgebaut. Dann stehen den Forschenden brillante Röntgenpulse unterschiedlicher Dauer zur Verfügung.



Das HZB bereitet junge Menschen sehr gut auf die Arbeitswelt vor: Milena Meschenmoser schloss ihre Ausbildung zur Feinwerkmechanikerin 2018 als Beste des Landes Berlin ab.

143

Doktoranden betreute das HZB im Jahr 2018. 32 Dissertationen wurden im vergangenen Jahr am HZB abgeschlossen.

8

Patente wurden dem HZB 2018 erteilt. Der Patentbestand des HZB umfasste zum Jahresende 2018 198 Patente. 27 Patente sind Gegenstand laufender Lizenzverträge. Bei elf Erfindungsmeldungen aus dem Jahr 2018 evaluieren das HZB und externe Technologieexperten derzeit, ob sie patentiert werden können und/oder wirtschaftlich verwertbar sind.

75

Kooperationen ist das HZB allein im Jahr 2018 mit Unternehmen neu eingegangen. Damit ist die Gesamtzahl der laufenden Partnerschaften mit der Industrie von 135 im Vorjahr auf nun 153 weiter gestiegen. Davon entfielen fast 19 Prozent auf Kooperationen mit internationalen Partnern und 16 Prozent auf gemeinsame Projekte mit kleinen und mittelständischen Unternehmen.

3.500

Schülerinnen und Schüler experimentierten 2018 in den beiden Schülerlaboren an den Standorten Wannsee und Adlershof. 60 Prozent von ihnen kamen aus Grundschulen, die anderen aus Gymnasien, Sekundarschulen oder Oberstufenzentren.

4,66

Millionen Euro nahm das HZB 2018 aus dem Technologietransfer ein. Etwas mehr als 1,61 Millionen Euro stammten aus Forschungs- und Entwicklungs-Kooperationen und FuE-Aufträgen mit Wirtschaftsunternehmen aus dem In- und Ausland, fast eine Million Euro aus anderen FuE-Kooperationen. Aus Infrastrukturverträgen stammten weitere 2,09 Millionen Euro.

9

Nachwuchsgruppen forschten 2018 am HZB. Alle neun Nachwuchsgruppen sind in den POF-Bereichen „Erneuerbare Energien“ und „Energimaterialien“ angesiedelt.

149

Tage in 13 Reaktorzyklen war der Forschungsreaktor BER II im Jahr 2018 im Leistungsbetrieb. Damit war an zehn Instrumenten insgesamt 1.484 Instrumententage regulärer Nutzerbetrieb möglich. 216 Instrumententage wurden für Instrumententwicklung und Wartung benötigt. Die verbleibenden 1.269 Experimententage konnten die internen und externen Messgäste für ihre Experimente nutzen.

35

Jugendliche und junge Erwachsene befanden sich Ende 2018 am HZB in Ausbildung.



BESCHLEUNIGERFORSCHUNG UND -WEITERENTWICKLUNG

Das HZB baut einen **APPLE II Undulator** für die Synchrotron-Lichtquelle SESAME, die 35 Kilometer nordwestlich der jordanischen Hauptstadt Amman steht. SESAME steht für „Synchrotron-light for Experimental Science and Applications in the Middle East“ und stellt brillantes Röntgenlicht für die Forschung zur Verfügung. Die Synchrotron-Lichtquelle der dritten Generation wurde 2017 in Betrieb genommen. Ägypten, Iran, Israel, Jordanien, Pakistan, die palästinensischen Autonomiegebiete, die Türkei und Zypern kooperieren für dieses einzigartige Projekt, um Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern aus dem Nahen Osten Zugang zu einem der vielseitigsten Werkzeuge der Forschung zu gewährleisten.

Bisher gibt es vier Strahlrohre an SESAME. Nun wird ein fünftes Strahlrohr eingerichtet. Es soll „weiches“ Röntgenlicht im Energiebereich zwischen 70 und 1800 Elektronenvolt erzeugen. Dieses Röntgenlicht eignet sich besonders dafür, Ober- und Grenzflächen von unterschiedlichen Materialien zu untersuchen, bestimmte chemische und elektronische Prozesse zu beobachten oder Kulturschätze schonend zu analysieren. Das neue Strahlrohr wird als Helmholtz-SESAME Beamline (HESEB) vom HZB sowie den Helmholtz-Zentren DESY (Federführung), Forschungszentrum Jülich, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf sowie dem Karlsruher Institut für Technologie aufgebaut. Die Helmholtz-Gemeinschaft investiert 3,5 Millionen Euro in das Projekt.

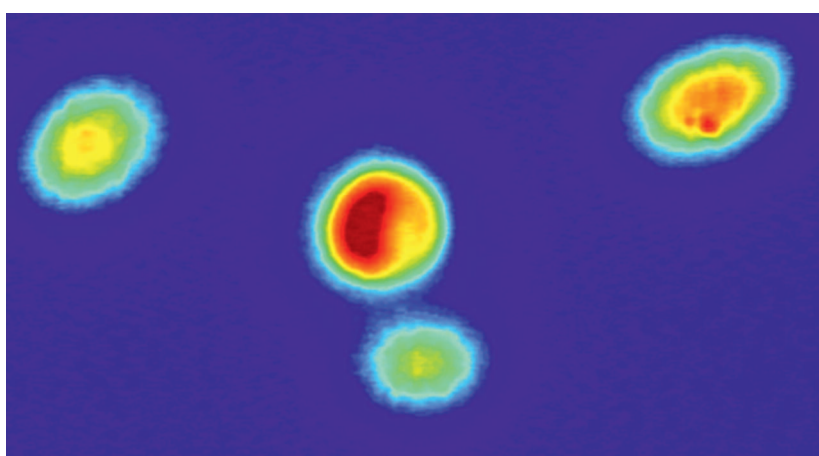
NEUER BETRIEBSMODUS AN BESSY II ERFOLGREICH GETESTET

In dem erstmals von Nutzern getesteten **Twin-Orbit-Modus kreisen Elektronenpakete** im Synchrotron BESSY II auf zwei unterschiedlichen Umlaufbahnen, ohne einander zu stören. Der Vorteil: So lassen sich bei Messungen ganz unterschiedliche Anforderungen an die Zeitstruktur der Photonenpulse gleichzeitig erfüllen.

Die erste „Twin-Orbit-Nutzertestwoche“ war ein großer Erfolg und verdeutlicht, dass der Modus künftig regelmäßig im Nutzerbetrieb angeboten werden könnte, sofern er weiterentwickelt wird. Der Twin-Orbit-Modus bietet zudem eine elegante Möglichkeit, beim Upgrade auf BESSY VSR lange und kurze Lichtpulse zu trennen. Um die beiden unterschiedlichen Umlaufbahnen zu erzeugen, mussten sich die Physiker vom HZB-Institut für Beschleunigerphysik intensiv mit nichtlinearen Effekten bei der Strahldynamik auseinandersetzen und diese sehr geschickt manipulieren, um Instabilitäten zu vermeiden. Der Elektronenstrahl besteht aus einzelnen Elektronenpaketen, die in bestimmten zeitlichen Abständen aufeinander folgen. Jede der zwei Umlaufbahnen kann weitgehend unabhängig voneinander mit solchen Elektronenpaketen gefüllt werden. Dadurch lassen sich an den Messplätzen entweder dichte Abfolgen von Lichtpulsen zur Verfügung stellen oder – ganz im Gegenteil – zeitlich voneinander sehr weit getrennte Lichtpulse. So können gleichzeitig unterschiedliche Nutzerexperimente mit dem passenden Licht beliefert werden.

Erste Experimente an der Metrology Light Source

Es ist ein spannender, aber auch langer Weg zu einem echten Nutzerbetriebsmodus, insbesondere wenn die Arbeiten an der Maschine den Nutzerbetrieb nicht stören dürfen. Die ersten Untersuchungen zu diesem Betriebsmodus begannen 2015 an der Metrology Light Source (MLS), einem kompaktem Speicherring der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt (PTB), und führten dort zu einem ersten Nutzerexperiment. Parallel wurden die ersten Experimente zu diesem Betriebsmodus von einem Team aus Beschleunigerphysikern und Strahlrohrbetreuern



Ein Abbild des Strahlungsquellpunktes an einem Dipolmagneten im Twin-Orbit-Modus. Der zweite Orbit schließt sich nach drei Umläufen und windet sich um den Standardorbit im Zentrum.

während der Wartungsphasen an BESSY II durchgeführt. Zwei Jahre später gelang es den HZB-Physikern, den Twin Orbit Modus über Nacht mit Top-Up-Injektion stabil zu halten, sodass die erste Testwoche im Nutzerbetrieb für Februar 2018 angesetzt werden konnte. Während der ganzen Testwoche gab es keine Ausfälle und Einbußen bei der Strahlstabilität, und die Bedingungen waren mit einer Verfügbarkeit von mehr als 99 Prozent vergleichbar gut wie beim Standard-Nutzerbetrieb.

Elegante Option für BESSY VSR

„Es gibt immer noch viel zu tun, aber wir haben mit dieser Testwoche gezeigt, dass es möglich ist, den Twin-Orbit-Modus im Nutzerbetrieb anzubieten. Und auch für unser Zukunftsprojekt BESSY VSR kann der Twin-Orbit-Modus eine elegante Möglichkeit bieten, lange und kürzere Lichtpulse voneinander zu trennen“, erklärt Prof. Andreas Jankowiak, der das HZB-Institut für Beschleunigerphysik leitet.

Dr. Paul Goslawski

Weiterführende Informationen zu dem ersten Experiment unter <http://accelconf.web.cern.ch/AccelConf/IPAC2015/papers/mopwa021.pdf> sowie zur Testwoche im Nutzerbetrieb unter <http://accelconf.web.cern.ch/AccelConf/ipac2017/papers/wepik057.pdf>.

MEILENSTEIN FÜR BERLINPRO: PHOTOKATHODE MIT HOHER QUANTENEFFIZIENZ

Ein Team am HZB hat den Herstellungsprozess von Photokathoden optimiert, sodass diese nun hohe Quanteneffizienz besitzen. Damit stehen geeignete Photokathoden zur Verfügung, um **2019 den ersten Elektronenstrahl in bERLinPro** zu erzeugen.

Am HZB entwickeln Teams aus der Beschleunigerphysik und SRF im Rahmen des Projekts bERLinPro einen supraleitenden Linearbeschleuniger mit Energierückgewinnung (Energy Recovery Linac). Darin wird ein intensiver Elektronenstrahl beschleunigt, der dann für unterschiedliche Anwendungen genutzt werden kann – wie die Erzeugung brillanter Synchrotronstrahlung. Nach dieser Nutzung werden die Elektronenpakete zum Linearbeschleuniger zurückgeleitet, wo sie nahezu ihre gesamte restliche

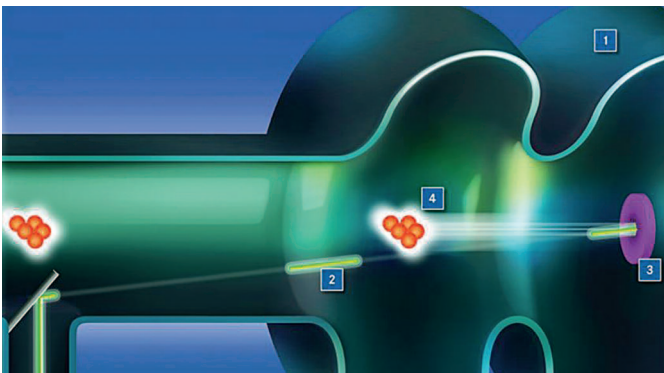
nahezu auf Lichtgeschwindigkeit beschleunigt werden, und eine Strahldiagnose-Beamline, in der wichtige Strahlparameter exakt vermessen werden können. Diese Komponenten wurden miteinander verbunden und erfolgreich getestet.

Photokathode als Elektronenquelle

Ein weiterer wichtiger Bestandteil des Konzepts ist die Elektronenquelle. Die Elektronen werden durch Beleuchtung einer Photokathode mit einem grünen Laserstrahl erzeugt. Dabei gibt die sogenannte Quanteneffizienz an, wie viele Elektronen das Photokathoden-Material bei einer bestimmten Laserwellenlänge und Laserleistung emittiert. Besonders hohe Quanteneffizienz im sichtbaren Bereich haben bialkalische Antimonide. Allerdings sind diese Dünnschichten hochreaktiv und damit sehr empfindlich, sodass sie nur im Ultrahochvakuum funktionieren. Ein HZB-Team um Martin Schmeißer, Dr. Julius Kühn, Dr. Sonal Mistry und Prof. Dr. Thorsten Kamps hat die Photokathode soweit entwickelt, dass sie für bERLinPro einsatzbereit ist. Sie optimierten dafür den Herstellungsprozess für Photokathoden aus Cäsium, Kalium und Antimon auf einem Molybdän-Substrat. Der neue Prozess liefert auch bei niedrigen Temperaturen die gewünschte hohe Quanteneffizienz und Stabilität. Das ist eine zentrale Voraussetzung für den Betrieb in einer supraleitenden Elektronenquelle, wo die Kathode bei Temperaturen weit unter dem Nullpunkt betrieben werden muss.

Mit ausführlichen Untersuchungen konnten die Physiker belegen: Auch nach dem Transport und Einschleusen in das Photokathoden-Transfer-System des SRF-Photoinjektors war die Quanteneffizienz der Photokathode noch etwa fünfmal höher als nötig, um den maximalen Strahlstrom bei bERLinPro zu erzielen. „Damit ist ein wichtiger Meilenstein erreicht. Wir haben nun die Photokathoden verfügbar, um 2019 den ersten Elektronenstrahl aus unserem SRF-Photoinjektor zu erzeugen“, sagt Prof. Dr. Andreas Jankowiak, Leiter des HZB-Instituts für Beschleunigerphysik. arö

Physical Review Accelerators and Beams, 2018 (DOI: 10.1103/PhysRevAccelBeams.21.113401): Addressing challenges related to the operation of Cs-K-Sb photocathodes in SRF photoinjectors; M. Schmeißer et. al.



Das supraleitende Photoinjektorsystem (1): Die Photokathode (3) wird durch einen grünen Laser (2) angeregt und emittiert Elektronen (4), die in der supraleitenden RF-Kavität beschleunigt werden.

Energie abgeben. Diese Energie steht so wieder für die Beschleunigung neuer Elektronenpakete zur Verfügung. Wissenschaftler am HZB haben bei der Entwicklung der weltweit einzigartigen Schlüsselkomponenten ein wichtiges Zwischenziel erreicht: Aus dem Zusammenspiel von Kathode, Laserpuls und elektrischem Feld in der Kavität sind zum ersten Mal in einem Testsystem Elektronen erzeugt und beschleunigt worden. Dafür haben die Forscherinnen und Forscher vier Komponenten, die zur Erzeugung der Elektronenpakete erforderlich sind, bis zur Teststrecke entwickelt und gebaut: eine Halbleiter-Photokathode aus Kalium-Cäsium-Antimonid; einen Laser, der Lichtpulse in unterschiedlichen Wellen- und Pulslängen auf die Kathode schießt; eine supraleitende Hochfrequenz-Kavität, in der Elektronenpakete

KAVITÄTEN AUS SUPRALEITENDEM NIOB

Vier Kavitäten sorgen in BESSY II dafür, dass die Elektronenpakete die Energie wieder aufnehmen, die sie als Röntgenlicht abgestrahlt haben. Für die Zukunftsprojekte bERLinPro und BESSY VSR entwickeln Teams **optimale Lichtpulse für Experimente**. Ihre Erfahrungen werden auch in die Planung von BESSY III einfließen.

Kavitäten sind Hohlraumresonatoren, die bestimmte Schwingungen oder Frequenzen aufnehmen und verstärken. Ein Beispiel aus der Akustik sind Orgelpfeifen: Bei einer bestimmten Tonhöhe bildet sich eine stehende Schallwelle aus – die Resonanz. Große Pfeifen verstärken tiefe Töne, kurze Pfeifen dagegen hohe Töne. Die Kavitäten in BESSY II werden mit elektromagnetischen Wechselfeldern angeregt. Bei der Resonanzfrequenz bilden sich stehende elektromagnetische Wellen in der Kavität. Durch dieses Wechselfeld werden Elektronenpakete geschickt. Sie nehmen Energie auf, falls sie genau dann ein treffen, wenn das Feld maximal nach vorne beschleunigt. Der Vorgang lässt sich gewissermaßen mit einer Schaukel vergleichen: Sie muss zur richtigen Zeit geschubst werden, um immer mehr Schwung zu bekommen. Die Elektronenpakete können in der Kavität jedoch nicht nur Energie aufnehmen, sondern auch abgeben.

Dieses Phänomen nutzen Experten beim Energie-Rückgewinnungs-Linearbeschleuniger bERLinPro (Berlin Energy Recovery Linac Project). Dabei werden die Elektronenpakete nach einer Umrundung noch einmal durch die Kavitäten geleitet – und zwar so, dass sie diesmal Energie an das Wechselfeld abgeben. Diese Energie steht dann für die Beschleunigung neuer Elektronenpakete bereit. „Allerdings müssen wir für bERLinPro supraleitende Kavitäten aus Niob einsetzen, die sehr starke Felder aushalten und dennoch störende Oberschwingungen sehr gut dämpfen können“, erklärt Prof. Dr. Jens Knobloch, Leiter des HZB-Instituts SRF – Wissenschaft und Technologie. Sein Team ist für die Entwicklung der Kavitäten und aller zugehörigen Komponenten verantwortlich.

Pionierarbeit am HZB für Hochstromkavitäten

Solche Kavitäten werden bereits an einigen Beschleunigern weltweit eingesetzt. Dennoch leistet das HZB Pionierarbeit: „Wir entwickeln die Kavitäten im Hinblick auf hohe Ströme weiter und finden dabei heraus, wie wir unerwünschte Schwingungen effizient unterdrücken können“, erklärt Dr. Axel Neumann aus Knoblochs Team. Dafür hat das HZB in den letzten Monaten eine umfangreiche Test-Infrastruktur aufgebaut. Diese Arbeiten kommen auch dem Upgrade von



Supraleitende Niob-Kavitäten sind notwendig, um einen Elektronenstrahl mit extrem großer Stabilität und Qualität zu generieren.

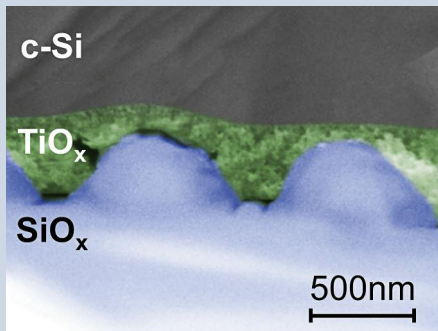
BESSY II auf BESSY VSR (Variabler Pulslängen-Speicherring) zugute. Das wichtigste Element von BESSY VSR ist die Kombination von zwei supraleitenden Hochstromkavitäten. Mit ihren Resonanzfrequenzen von 1,5 Gigahertz und 1,75 Gigahertz sorgen sie dafür, dass eine Schwebung entsteht. Sie führt zu einem interessanten Phänomen: Durchqueren Elektronenpakete die Doppelkavität, werden manche auf ein Zehntel ihrer Ausdehnung komprimiert, andere nicht. Die komprimierten Elektronenpakete geben dann ultrakurze Lichtpulse von circa 1,5 Pikosekunden ab, während die anderen Lichtpulse von circa 15 Pikosekunden produzieren. Dadurch haben Forscherinnen und Forscher bei Messungen am künftigen BESSY VSR die Wahl: Sie können Lichtpulse der optimalen Dauer für ihr Experiment nutzen – mit gewohnter voller Brillanz des Strahls.

Die Erfahrungen aus beiden Projekten sind wichtig für die Zukunft. „Wir können jetzt noch nicht genau sagen, wie BESSY III aussehen wird, aber wir lernen durch diese Projekte sehr viel für das Design und den Betrieb neuartiger Kavitäten für Speicherringe, sodass wir neue Ideen entwickeln können“, sagt Jens Knobloch.

red/arö

RAUE OPTIK, GLATTE OBERFLÄCHE

EINE HZB-NACHWUCHSGRUPPE LÄSST EINE **NANO-STRUKTUR FÜR SOLARZELLEN** PATENTIEREN.

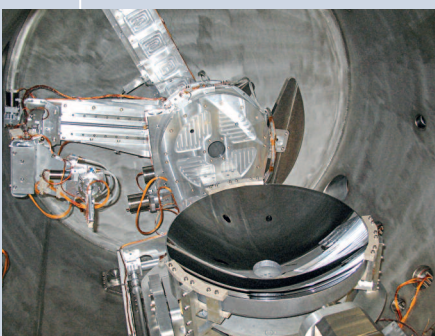


Die Nanostruktur zum Lichteinfang wird auf Siliziumoxid (blau) eingepägt und dann mit Titanoxid (grün) „eingebnet“. So entsteht eine optisch raue, aber dennoch glatte Schicht, auf der kristallines Silizium aufwachsen kann.

Kristalline Dünnschichtsolarzellen aus Silizium sind preisgünstig und schaffen Wirkungsgrade von gut 14 Prozent. Sie könnten allerdings noch mehr leisten, wenn ihre glänzenden Oberflächen weniger Licht reflektieren würden. Eine raffinierte, neue Lösung für dieses Problem hat ein Team um Prof. Dr. Christiane Becker nun patentieren lassen: eine besondere Oberflächenstrukturierung. „Es reicht nicht aus, einfach mehr Licht in die Zelle zu bringen“, weiß Becker. Denn Oberflächenstrukturen können den Wirkungsgrad im Endeffekt sogar verringern, indem sie die elektronischen Eigenschaften des Materials verschlechtern. Die Idee, die David Eisenhower im Rahmen seiner Promotion im Team von Becker ausgearbeitet hatte, klingt einfach, erfordert aber einen ganz neuen Ansatz: Es geht darum, eine Struktur herzustellen, die sich „optisch rau“ verhält und das Licht gut streuen kann, gleichzeitig aber eine „glatte“ Oberfläche besitzt, auf der sich nahezu defektfrei die gewünschte Siliziumschicht herausbilden kann. Das Verfahren besteht aus mehreren Schritten: Zunächst stempeln die Forscher eine optimierte Nanostruktur auf eine noch flüssige Siliziumoxid-Vorläuferschicht, die im Anschluss ausgehärtet wird. Dabei handelt es sich um winzige, regelmäßig angeordnete, zylinderförmige Erhöhungen, die Licht „einfangen“

und in die Solarzelle leiten. Anschließend wird in einem weiteren Schritt eine sehr dünne Schicht aus Titanoxid aufgebracht. Dadurch werden die Vertiefungen zwischen den Zylindern ausgefüllt, so dass eine relativ glatte Oberfläche entsteht, auf der das eigentliche Absorbermaterial gut aufgetragen werden kann. Die Beschichtung, die nun patentiert ist, besitzt den passenden Namen „SMART“ (smooth anti-reflective three-dimensional texture).

20 JAHRE METROLOGIE FÜR DIE EUV-LITHOGRAPHIE IM LABOR DER PTB



Das EUV-Reflektometer der PTB mit einem Prototyp-Kollektorspiegel für eine gepulste Laser-Plasma EUV-Lichtquelle.

Die Miniaturisierung im Bereich der Mikroelektronik erfordert die fortlaufende Verringerung der für die EUV-Lithographie verwendeten Wellenlänge, um die notwendige Auflösung zu erreichen. Carl Zeiss SMT als Hersteller der Objektive für Lithographie-Maschinen der niederländischen Firma ASML begann 1998 eine Zusammenarbeit mit der PTB zur Entwicklung von Optiken für den Bereich des EUV (Wellenlängen von nur 13,5 nm statt 193 nm, tiefes UV).

Der Beitrag der PTB war es, ihre weltweit führenden radiometrischen Messappara-

turen am HZB zur Bestimmung der optischen Eigenschaften dieser Spiegel bei der Arbeitswellenlänge zu nutzen. Die PTB erweitert kontinuierlich ihre messtechnischen Dienstleistungen für Halbleiteranwendungen über die Lithographie hinaus und arbeitet im Rahmen von EU-H2020-Projekten mit Partnern aus der europäischen Industrie an der Entwicklung von EUV- und Soft-Ray-basierter Metrologie für die Nanostrukturen auf den Wafern. *Frank Scholz/PTB*

NEUES STANDARDWERK ZU ENERGIE-TECHNOLOGIEN

Vertreter des Wuppertal Instituts für Klima, Umwelt, Energie haben dem Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) einen mehrbändigen Bericht zu Energietechnologien übergeben. Für das Projekt, das vom BMWi gefördert wurde, hat das Wuppertal Institut die Expertise von zwölf renommierten Forschungseinrichtungen zusammengeführt. Prof. Dr. Rutger Schlatmann, Direktor des HZB-Instituts PVcomB, und Dr. Björn Rau haben maßgeblich am Berichtsteil Photovoltaik mitgearbeitet. Der Bericht gibt einen umfassenden Überblick zum Innovations- und Marktpotenzial der einzelnen PV-Technologien, bewertet Chancen und Risiken sowie den möglichen Beitrag zur Umsetzung der Energiewende und zeigt den Forschungs- und Entwicklungsbedarf.

ERC STARTING GRANT AN ANTONIO ABATE

DER WISSENSCHAFTLER ERHÄLT DIE BEDEUTENDE FÖRDERUNG FÜR SEIN FORSCHUNGSPROJEKT ZU PEROWSKIT-SOLARZELLEN AM HZB.



Dr. Antonio Abate zählt zu den international bekannten Perowskit-Forschern.

Der ERC Starting Grant fördert herausragende Forscherinnen und Forscher in einer frühen Phase ihrer wissenschaftlichen Karriere mit bis zu 1,5 Millionen Euro für fünf Jahre und gilt als eine der wichtigsten europäischen Auszeichnungen. Dr. Antonio Abate leitet seit 2017 am HZB eine Helmholtz-Nachwuchsgruppe zum Thema metallorganische Perowskit-Solarzellen. Abate war 2012 im Team von Henry Snaith in Oxford, als es dort gelang, den Wirkungsgrad sprunghaft auf elf Prozent zu steigern. Inzwischen erreichen sie Wirkungsgrade von mehr als zwanzig Prozent. Mit dem ERC Starting Grant will Abate Perowskit-Schichten entwickeln, in denen das umweltschädliche Blei durch weniger problematische Elemente ersetzt werden kann.

„APPLE OF INSPIRATION“ FÜR DREI HZB-FORSCHER

DER SLOWENISCHE PRÄSIDENT WÜRDIGT DAMIT DIE ARBEIT VON DR. MARKO JOŠT, PROF. STEVE ALBRECHT UND PROF. BERND RECH.



V.l.n.r.: Marko Topic, Bernd Rech, Janez Krc, Benjamin Lipovsek, Steve Albrecht und Marko Jošt mit Sloweniens Staatspräsident Borut Pahor.

Der „Apple of Inspiration“ ist eine Ehrung, die das slowenische Staatsoberhaupt in der Regel nur an einheimische Persönlichkeiten verleiht. Er würdigt damit Leistungen aus Kultur, Wissenschaft, Sport und Gesellschaft. Als erste Ausländer erhielten die HZB-Wissenschaftler Dr. Marko Jošt, Prof. Dr. Steve Albrecht und Prof. Dr. Bernd Rech den Preis zusammen mit Kollegen der Universität Ljubljana. Die Teams aus Ljubljana und Berlin wurden damit für ihre langjährige Zusammenarbeit geehrt, die unter anderem zu Meilensteinen bei der Entwicklung von Perowskit-Solarzellen und damit zur Stärkung der Forschung an alternativen Energiequellen geführt hat, hieß es in der Laudatio.

WICHTIGE BERUFUNGEN

Prof. Dr. Marcus Bär, Leiter der HZB-Abteilung „Grenzflächen-design“, ist Professor für Röntgenspektroskopie an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg. Die Professur wurde in Kooperation mit dem Forschungszentrum Jülich eingerichtet, um das Helmholtz-Institut Erlangen-Nürnberg für Erneuerbare Energien (HI ERN) zu verstärken.

Prof. Dr. Andrea Denker wurde von der Beuth Hochschule für Technik Berlin und dem HZB auf den gemeinsamen Lehrstuhl „Beschleunigerphysik für die Medizin“ berufen. Die Physikerin leitet seit 2006 die Abteilung „Protonentherapie“ am HZB, die den Beschleuniger für die Augentumorthherapie betreibt.

Prof. Dr. Thorsten Kamps, Leiter einer Arbeitsgruppe am Institut für Beschleunigerphysik, wurde von der Humboldt-

Universität zu Berlin und dem HZB gemeinsam zum Professor für „Beschleunigerphysik – Erzeugung und Charakterisierung von hochbrillanten Elektronenstrahlen“ ernannt.

Prof. Dr. Tobias Lau hat eine Sonderprofessur für „Maßgeschneiderte Materialeigenschaften – Cluster und Synchrotronspektroskopie“ an der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg angetreten. Die Berufung ermöglicht es ihm, am HZB als Abteilungsleiter zu forschen und an der Universität Freiburg zu lehren.

Prof. Dr. Atoosa Meseck wurde von der Johannes-Gutenberg-Universität Mainz und dem HZB auf die gemeinsame Professur für „Beschleunigerphysik – Kollektive Effekte und nichtlineare Strahldynamik“ berufen. Meseck erforscht neuartige Konzepte für Undulatoren, die für die Erzeugung hochbrillanter Synchrotronstrahlung unentbehrlich sind.

Wissenschaftlicher Beirat
Vorsitzender: Prof. Dr. Jack Fletcher

Wissenschaftlich-Technischer Rat
Vorsitzende: Prof. Dr. S. Schorr

Gesellschafterversammlung
(Bund und Land Berlin)

Aufsichtsrat
(Vorsitzender: Dr. Volkmar Dietz)

Wissenschaftliche GF Prof. Dr. J. Lüning
Prof. Dr. B. Rech (Sprecher)

Kaufmännische GF Th. Frederking

Betriebsrat
Vorsitzender: N. Beck

Geschäftsführungsbüro (Dr. A. Hasselberg) GF-GB
Energie und Information (NN) GF-EI
Technologietransfer und Innovation (NN) GF-TTI
Recht und Verträge (Dr. U. Behms) GF-RV
Compliance Management (C. Pursian) GF-CM

Erneuerbare Energie
Sprecher: Prof. Dr. R. Schlattmann

EE-IS
Silizium-Photovoltaik (Prof. Dr. N. Nickel*)
EE-IF
Solare Brennstoffe (Prof. Dr. R. van de Krol)
EE-IP
Kompetenz-Zentrum Photovoltaik Berlin (Prof. Dr. R. Schlattmann)
EM-AID
Grenzflächendesign (Prof. Dr. M. Bär)
EM-NSIP
Nano-SIPPE (Prof. Dr. C. Becker)
EE-NPET
Perowskit Tandemsolarzellen (Prof. Dr. S. Albrecht)
EE-NOGP
Operando Grenzflächen-Photochemie (Dr. R. Seidel)
Materialien und Grenzflächen für stabile Perowskit Solarzellen (Dr. A. Abate)
EE-NMIP
Hybride Materialien Formierung und Skalierung EE-NYFS
Elektrochemische Umwandlung von CO₂ (Dr. M. Mayer)
EE-NECC
Nanoskalige Operando CO₂-Photo-Elektrokatalyse (Dr. C. Kley)
EE-NCO
Gestaltung des Sauerstoffentwicklungsmechanismus (Dr. M. Risch)
EE-NOME
Materialtransformationen in Elektrokatalysatoren (Dr. O. Kasian)
EE-NMIET
Molekulare Systeme (Prof. Dr. N. Koch)
EE-GMS
Generative Fertigungsprozesse (Prof. Dr. E. List-Kratochvil)
EE-GGP
Simulation von Energiewerkstoffen (Prof. Dr. J. Dzubiella)
EE-GSEM

Energie Materialien
Sprecher: Prof. Dr. S. Schorr

EM-ISFM
Weiche Materie und Funktionale Materialien (Prof. Dr. M. Ballauff)
EM-IAM
Angewandte Materialforschung (Prof. Dr. J. Banhart)
EM-ISPEK
Institut für Nanospektroskopie (Prof. Dr. S. Raoux)
EM-IFOX
Funktionale Oxide für die energieeffiziente IT (Prof. Dr. C. Dubourdieu)
EM-IQM
Quantenphänomene in neuen Materialien (Prof. Dr. B. Lake)
EM-ALTS
Lokal Empfindliche und Zeitaufgelöste Spektroskopie (Dr. I. Wilkinson)
EM-ASD
Struktur und Dynamik von Energiematerialien (Prof. Dr. S. Schorr)
EM-AMCT
Methoden zur Charakterisierung von Transportphänomenen in Energiematerialien (Dr. K. Habicht)
EM-AMGS
Materialien für grüne Spintronik (Prof. Dr. O. Rader)
EM-AMGE
Mikrostruktur- und Eigenschaftsanalyse (Prof. Dr. Ch. Geisel)
EM-GKAT
Energiekatalyse (Prof. Dr. R. Schögl)
EM-NQUAM
Berlin Joint Lab für Quantenmagnetismus (Prof. Dr. J. Reuther)

Forschung an Großgeräten
Sprecher: Prof. Dr. A. Föhlisch

FG-ISRR
Methoden und Instrumentierung der Forschung mit Synchrotronstrahlung (Prof. Dr. A. Föhlisch)
FG-IA
Beschleunigerphysik (Prof. Dr. A. Jankowiak)
FG-ISRF
SRF - Wissenschaft und Technologie (Prof. Dr. J. Knobloch)
FG-ANT
Nanometroskopie und Technologie (Dr. J. Viehhaus*)
FG-AUND
Undulatoren (Dr. J. Bahrdt)
FG-AHSX
Hochempfindliche Röntgenspektroskopie (Prof. Dr. T. Lau)
FG-GUD
Ultraschnelle Dynamik (Prof. Dr. M. Bargheer)

Nutzerplattform
Sprecher: Prof. Dr. A. Jankowiak

NP-ACO
Nutzerkoordination (Dr. A. Vollmer)
NP-ABR
Betrieb Reaktor BER II (Dr. S. Weizel)
NP-ABS
Betrieb Beschleuniger BESSY II (Prof. Dr. A. Jankowiak)
S-MLS
Betrieb MLS (K. Bürkman-Gehlein)
S-PT
Protonentherapie (Prof. Dr. A. Denker)
S-PG
Präzisionspitter (Prof. Dr. M. Löggen)
NP-AHFM
Hochfeldmagnet (Prof. Dr. B. Lake)
NP-AOS
Optik und Strahlrohre (Dr. J. Viehhaus)
NP-HI
Experimentnahe Technik 1 (Dr. A. Rupp)
NP-AUN
Technische Nutzerunterstützung BER II (Dr. A. Rupp)
NP-ASE
Probennutzung (Dr. K. Kiefer)
NP-APMD
Verfahrensmanagement Stilllegung BER II (Dr. A. Rupp)
NP-HII
Experimentnahe Technik 2 (Dr. C. Jung)
NP-AUP
Technische Nutzerunterstützung BESSY II (R. Schulz)
NP-ATD
Konstruktion (L. Drescher)
NP-AMAN
Fertigung (K. Tietz)
NP-GMX
Makromolekulare Kristallographie (Prof. Dr. M. Wahl)
NP-GXM
Röntgenmikroskopie (Prof. Dr. H. Ewers)

Projekte

Berlin Energy Recovery Linac Prototype (BERLinPro) (Prof. Dr. A. Jankowiak, Prof. Dr. J. Knobloch, Prof. Dr. J. Reuther)
Rückbau BER II (Dr. S. Weizel / Dr. A. Rupp)
HEMFT Energy Materials Foundry (HEMFT) (Prof. Dr. R. van de Krol)
BESSY-VSR (Prof. Dr. A. Jankowiak, Prof. Dr. J. Knobloch, Prof. Dr. A. Föhlisch)
Helmholtz Energy Materials Foundry (HEMFT) (Prof. Dr. R. van de Krol)

Institut
Nachwuchsgruppe/ Joint Laboratory
Gemeinsame Forschergruppe
Hauptabteilung / Abteilung
Sonderaufgabe
Gremium

* = kommissarische Leitung

Administration (Dr. D. Stiller) A
Personal und Soziales (V. Meyer) A-PS
Finanz- und Rechnungswesen (Dr. D. Stiller) A-FR
Einkauf und Materialwirtschaft (D. Höcker) A-EM
Facility Management (R. Müller) FM
Planen und Bauen (O. Schüller) FM-B
Gebäude- und Anlagentechnik (U. Grabe) FM-T
Innere Dienste (M. Nadolski) FM-I
Objektbetreuung (F. Deisenbeck) FM-O
Chemikalien und Sonderabfälle (J. Beckmann) FM-C
Zentralstelle für radioaktive Abfälle des Landes Berlin (J. Beckmann) S-ZRA
Informationstechnik (A. Finke) IT
Frontoffice und Helpdesk (A. Finke) IT-FH
Dienste und Software (I. Heinzel) IT-DS
Experimentsteuerung u. Datenerfassung (O.-P. Sauer) IT-ED
Infrastruktur (Dr. D. Herrendörfer) IT-IS
Beauftragte Personen für Sicherheit und Strahlenschutz (Th. Frederking)
Zentrale Sicherheit (R. Müller) GF-ZS
Strahlenschutz (Dr. G. Buchert) GF-SZ

Lageplan

Am HZB-Standort Wannsee befindet sich der Lise-Meitner-Campus mit der Forschungsneutronenquelle BER II, am HZB-Standort Adlershof der Wilhelm-Conrad-Röntgen-Campus mit dem Elektromagnetspeicherring BESSY II.



IMPRESSUM

HZB-Highlight-Bericht 2018 des Helmholtz-Zentrums Berlin für Materialien und Energie GmbH. Nachdruck nur mit ausdrücklicher Genehmigung des Herausgebers.
Redaktionsschluss: Juni 2019

Herausgeber:
Helmholtz-Zentrum Berlin, Hahn-Meitner-Platz 1, 14109 Berlin,
Telefon: (030) 80 62-420 34

Redaktion:
Dr. Ina Helms (ih, V.i.S.d.P.), Antonia Rötger (arö, Gesamtkoordination), Silvia Zerbe (sz),
E-Mail: ina.helms@helmholtz-berlin.de,
Anschrift wie Herausgeber

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

Konzept und Realisierung:
Christoph Neuschäffer (cn), Telefon: (089) 20 20 68 66

Mitarbeit: Ralf Butscher (rb), Roland Knauer (rk)

Übersetzung und Lektorat: Peter Gregg, Gill Elaine Schneider

Gestaltung und Layout: Klaus Dieter Krön

Bildredaktion:
Christoph Neuschäffer

Bildbearbeitung: Lothar Trutter

Andruck: Trumedia GmbH, Tattenbachstraße 19, 86179 Augsburg

Druck:
Elbe Druckerei Wittenberg GmbH, Breitscheidstraße 17a,
06886 Lutherstadt Wittenberg
Telefon: 03491 41 02 42, Telefax: 03491 41 02 40
E-Mail: info@elbedruckerei.de, www.elbedruckerei.de

Fotonachweis: Alle Fotorechte liegen beim HZB, außer: Titel HZB/Phil Dera, S. 2 HZB/David Ausserhofer, S. 3 HZB/Phil Dera, S. 5 HZB/Phil Dera, HZB/Michael Setzpfandt, S. 6 Dbachmann, Museum of Cultural History/University of Oslo/Eirik Irgens Johnsen, HZB/Wiley VCH, HZB/Volker Mai, S. 7 Natural History Museum, London, Universität Potsdam/Christian Tötze, S. 8 HZB/Phil Dera, S. 9 Uni Potsdam, S. 10 HZB/Saule Magomedoviene, S. 11 HZB/M. Künsting, S. 12 ACS Energy Letters, S. 14 HZB/Carlo Barth, S. 15 P. Knittel/Fraunhofer IAF, S. 20 HZB/Michael Setzpfandt, S. 21 HZB/T. Splettstoesser, S. 24 HZB/Volker Mai, S. 26 The Royal Society of Chemistry, S. 27 N. Meng/Tianjin University, S. 28 The Royal Society of Chemistry, S. 29 Yinglan Guo/Thilo Stehle, S. 31 Luftbild: HZB/Dirk Laubner, S. 32 HZB/Michael Setzpfandt, S. 34 Britta Mießen, S. 36 PTB, S. 37 HZB/J. Böhm, University of Ljubljana

Kontakt

Lise-Meitner-Campus

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

Wilhelm-Conrad-Röntgen-Campus

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

Institut für Silizium-Photovoltaik

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

PVcomB

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