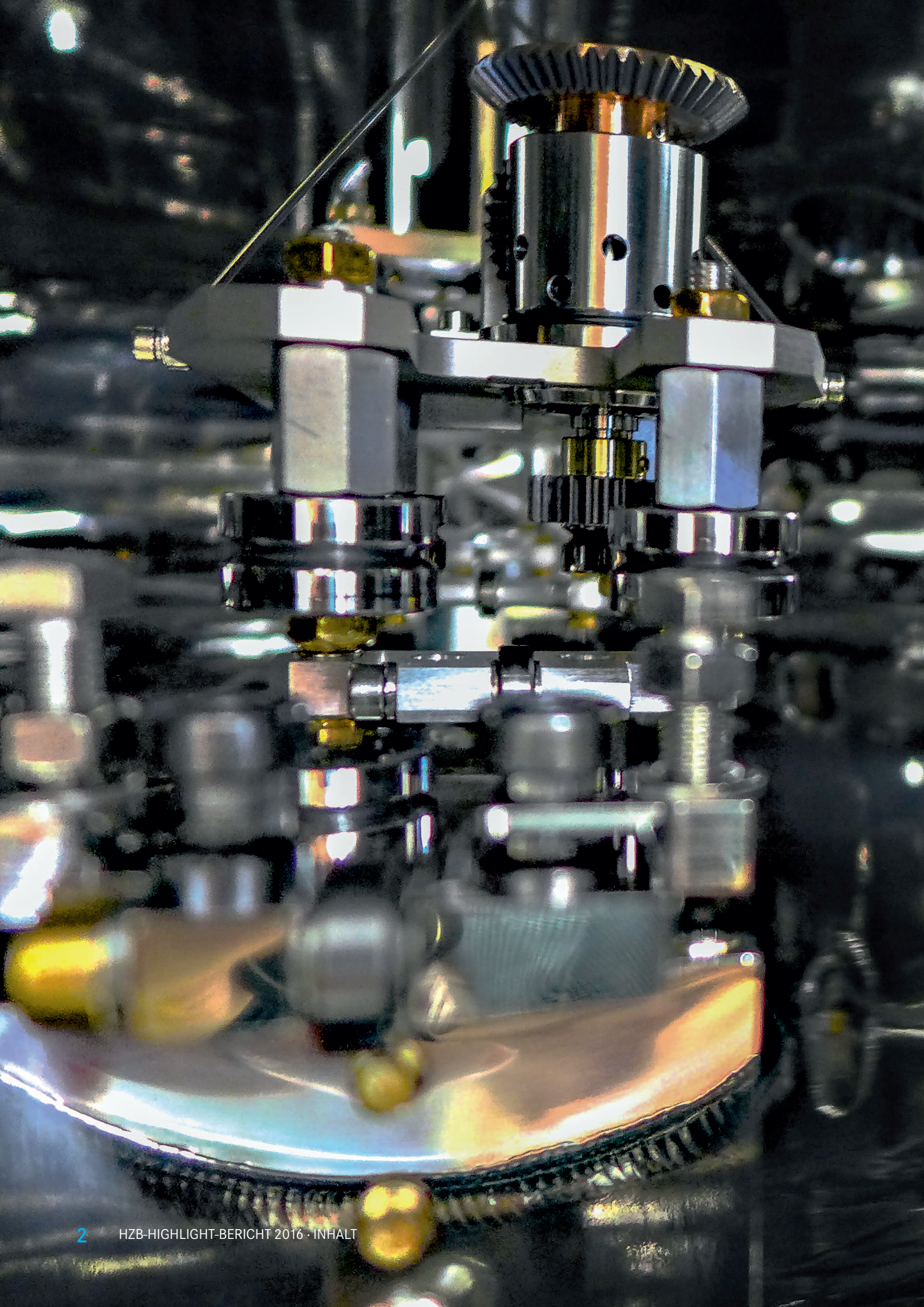


ENERGIEN BÜNDELN VISIONEN REALISIEREN



# HIGHLIGHTS 2016

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





## INHALT

<b>Vorwort</b>	<b>04</b>		
Interview: Grünes Licht für BESSY-VSR	06		
<b>Energiematerial-Forschung</b>	<b>08</b>		
Neue Entwicklungen in der Spintronik	10		
Lokale magnetische Monopole	12		
Laserinduziertes Umschalten von Bits	13		
„Flüssige“ Quantenspins beobachtet	14		
Nachweis einer Mulde	15		
Wie Defekte in CIGSe-Zellen entstehen und verschwinden	16		
Schutzschild für das „künstliche Blatt“	17		
Mehr Energie aus der Sonne durch Spins	18		
EMIL startklar für „Power-to-X“	19		
Atomares Platzrücken	20		
Energiespeichermaterialien unter Druck	22		
Energie speichern mit Silizium-Dünnschichten	23		
<b>Methodenentwicklung für die Forschung mit weicher Röntgenstrahlung</b>	<b>24</b>		
Schnelle Suche nach neuen Wirkstoffen	25		
Standard-Röntgenspiegel für ultraschnelle Experimente	26		
Neuer Rekord beim Aufstellen einer Ionenfalle	27		
<b>Beschleunigerforschung und -weiterentwicklung</b>	<b>28</b>		
HZB auf dem Weg zum Linearbeschleuniger	29		
		Die Elektronenquelle nimmt Gestalt an	30
		<b>Zahlen und Fakten aus dem HZB</b>	<b>32</b>
		<b>Nutzerexperimente</b>	<b>34</b>
		X-Ray CoreLab steht bereit	35
		Wie Wasser Glas bewegt	36
		Ping-Pong mit Skyrmionen	37
		Die kurze Welle	38
		Wasseroxidation – dynamischer als gedacht	39
		Mehr Power bei der Wasserspaltung	40
		Ein superflacher Kristall für den Computerchip der Zukunft	41
		Mit der Tandemstruktur zu mehr Effizienz	42
		Platinkatalysator für das Wasserstoffauto	43
		Selbstheilung im Weltall	45
		Fortschritte im Kampf gegen das Zika-Virus Schwächen statt töten	46
		Was Zähne fester macht als jede Füllung	48
		Sanftes Entkoppeln legt Nanostrukturen frei	49
		<b>Vermischtes/Anhang</b>	<b>51</b>
		Vermischtes	51
		Organigramm des HZB	54
		Lageplan, Impressum	55

---

## EINE BILANZ, DIE SICH SEHEN LASSEN KANN

2016 war ein ereignisreiches Jahr für das Helmholtz-Zentrum Berlin: In Adlershof ist im Oktober der Laborkomplex EMIL@BESSY II (Energy Materials In situ Laboratory) im Beisein von Bundesforschungsministerin Johanna Wanka eröffnet worden; in Wannsee hat das HZB den Neubau eines Laborgebäudes für Energiematerialien begonnen. Das sind zwei Beispiele dafür, wie das HZB nach seinem zweijährigen, erfolgreich abgeschlossenen Strategieprozess weiter in den Ausbau von notwendigen Infrastrukturen investiert. Dieses Engagement ist entscheidend, um auch in Zukunft Forschungsergebnisse auf Spitzenniveau zu erzielen und das Profil des HZB zu stärken.

Eine Online-Umfrage, die wir Anfang dieses Jahres durchgeführt haben, zeigt die Sichtbarkeit des eingeschlagenen Weges. Demnach kennen zwei Drittel der Befragten das Forschungsprofil des HZB. Dass wir an Energiematerialien forschen, wissen zum Beispiel 64 Prozent der Befragten, die Photovoltaikforschung geben 61 Prozent als bekannt an und 58 Prozent wissen, dass die Forschung mit Synchrotron-Strahlung zum HZB gehört. 48 Prozent nennen außerdem die Forschung mit Neutronen als HZB-Thema.

Ergebnisse aus all diesen Themenbereichen finden sich im Highlight-Bericht 2016. Und natürlich präsentieren wir auch wieder Beispiele, wie erfolgreich die Nutzerinnen und Nutzer an den von uns betriebenen Forschungsinfrastrukturen BESSY II und BER II arbeiten.

Eine Herausforderung lag in den vergangenen Jahren darin, den Ausbau unserer Synchrotronstrahlungsquelle BESSY II zum Variablen Pulslängen-Speicherring BESSY VSR sicherzustellen. Diese strategische Schwerpunktsetzung, die 2015 im Strategiepapier verabschiedet worden ist und von allen internen und externen Gremien unterstützt wurde, hat 2017 eine Finanzierungszusage erhalten. Dies sind die Früchte der Anstrengungen aller Beteiligten am HZB in Forschung und Administration, und es ist ein wichtiges Bekenntnis unserer Zuwendungsgeber zum Standort Berlin als Zentrum für die Forschung mit weicher Röntgenstrahlung. Im vorliegenden Highlight-Bericht können Sie lesen, dass für diesen Erfolg viele kleine Schritte nötig waren. Wissenschaftlicher Forscherdrang, geniale Ideen und jahrzehntelange Erfahrung bei der Entwicklung



Prof. Dr. Bernd Rech und Thomas Frederking.

und beim Betrieb der Synchrotronstrahlungsquelle haben sich geschickt verbunden, um im strategisch günstigen Augenblick in Erscheinung zu treten.

Wissenschaftliche Freiheit und strategischer Weitblick gehören also zwingend zusammen, wenn ein großes Forschungszentrum wie das HZB erfolgreich sein will. Diese beiden Aspekte in den vergangenen Jahren wirkungsvoll zusammengebracht zu haben, ist das Verdienst von Prof. Dr. Anke Kaysser-Pyzalla, wissenschaftliche Geschäftsführerin des HZB von 2009 bis 2017. Sie hat die überaus anspruchsvolle Aufgabe mit viel Ausdauer und Weitblick gemeistert, zwei Zentren – eines aus der Leibniz-Gemeinschaft, das andere aus der Helmholtz-Gemeinschaft kommend – und ihre ganz verschiedenen Kulturen zu einem leistungsfähigen Ganzen zusammenzuschweißen.

Nachdem das Zentrum in seiner heutigen Gestalt entstanden und seine Weiterentwicklung im Rahmen der Strategie 2020+ ausgearbeitet worden ist, hat sie Ende des vergangenen Jahres beschlossen, sich neuen Aufgaben zuzuwenden. Im Frühsommer 2017 hat Anke Kaysser-Pyzalla das Amt der Präsidentin der Technischen Universität Braunschweig übernommen. Wir wünschen ihr bei der Gestaltung ihrer neuen Wirkungsstätte viel Erfolg.

Beim Durchblättern des Hefts wird Ihnen auffallen, dass das HZB neue Impulse im Bereich Materialien für eine zukünftige Informationstechnologie setzt. Ein Beispiel sind am HZB untersuchte „flüssige“ Quantenspins, bei denen Elektronenspins auch noch sehr nahe am absoluten Temperatur-Nullpunkt beweglich bleiben und die möglicherweise Bausteine von zukünftigen Quantencomputern werden können. Das HZB arbeitet hier an der vordersten Linie der wissenschaftlichen Erkenntnis. Dabei bewegen wir uns zwar im Bereich der reinen Grundlagenforschung – aber immer mit dem Blick auf mögliche Anwendungen. Es ist schon jetzt absehbar, dass diese Ergebnisse die Bauweise von Computern der Zukunft stark beeinflussen können.

Nach wie vor hat natürlich auch die Forschung an neuen Photovoltaik-Materialien und solaren Brennstoffen einen sehr hohen Stellenwert am HZB: Dabei geht es sowohl um die Weiterentwicklung bereits vorhandener Systeme als auch um die Entwicklung gänzlich neuer Materialsysteme wie zum Beispiel Perowskit-Silizium-Kombinationen. Dabei werden zwei Solarzellen aus unterschiedlichen Materialien geschickt zu einer Tandem-Solarzelle vereint. Dadurch können die Forscher deutlich höhere Wirkungsgrade erzielen als es bei einer voneinander unabhängigen Weiterentwicklung möglich wäre. Weil Perowskite so vielversprechend sind, hat das HZB 2016 seine Expertise auf diesem Gebiet mit dem Aufbau von zwei neuen Nachwuchsgruppen unter

Leitung von Dr. Steve Albrecht beziehungsweise Dr. Antonio Abate deutlich gestärkt (Seite 52). Und dank unseres erfolgreichen Antrags HySPRINT, das steht für „Hybrid Silicon Perovskite Research, Integration & Novel Technologies“, können wir außerdem den Technologietransfer auf diesem Gebiet mit Mitteln der Helmholtz-Gemeinschaft stärken.

Ein anderes Thema, das uns schon länger begleitet, ist die Entwicklung von Systemen für die künstliche Photosynthese. Ein Team am HZB-Institut ist einem Verfahren auf der Spur, wie dieses Konzept wirklich praxistauglich werden kann – ohne dass sich die wesentlichen Bausteine des künstlichen Blatts, die Elektroden, innerhalb kürzester Zeit selbst zerstören. Diese und viele weitere Erkenntnisse, von denen unser Highlight-Bericht erzählt, sind wichtige Bausteine auf dem Weg zu einer sauberen, CO<sub>2</sub>-armen Wirtschaftsweise.

All das ist nur möglich, weil wir am HZB kontinuierlich in unsere Forschungsinfrastruktur investieren, neue wissenschaftliche Konzepte dafür erarbeiten und erfolgreich die erforderliche Finanzierung einwerben. Von den brillanten Forscherinnen und Forschern, die wir auch im vergangenen Jahr wieder für das HZB begeistern und gewinnen konnten, sei an dieser Stelle Dr. Catherine Dubourdieu genannt. Seit April 2016 leitet sie das HZB-Institut „Funktionale Oxide für die Energieeffiziente Informationstechnologie“: Sie heißen wir stellvertretend für alle neu an das HZB gekommenen Kolleginnen und Kollegen mit der Titelseite dieses Hefts herzlich willkommen.

Ihnen, unseren Leserinnen und Lesern, wünschen wir nun eine informative Lektüre. Wie immer freuen wir uns auf Ihre Anmerkungen und Anregungen zur Weitergestaltung unseres HZB-Highlight-Berichts.



Prof. Dr. Bernd Rech  
Wissenschaftlicher  
Geschäftsführer



Thomas Frederking  
Kaufmännischer  
Geschäftsführer

---

## GRÜNES LICHT FÜR BESSY VSR

BESSY II hat sich seit 1998 als führende Weichröntgenquelle in Deutschland und Europa etabliert. An fast 50 Beamlines wurden einzigartige Instrumente für die Analyse von Energieforschungsmaterialien installiert. Nun wurde der Ausbau zu BESSY VSR, einem variablen Pulslängenspeicherring, bewilligt. Die Beschleunigerphysiker **Prof. Dr. Andreas Jankowiak** und **Prof. Dr. Jens Knobloch** berichten, wie sich jahrelange Vorarbeiten wie Puzzlesteine in ein größeres Bild eingefügt haben, und welche Hürden noch zu nehmen sind.

### Was ist das Besondere an BESSY VSR?

**AJ:** BESSY VSR bietet einen riesigen Mehrwert für die Forschung. An den Experimenten kann das Team auswählen, ob die Proben mit Lichtpulsen von 15 Pikosekunden oder nur 1,5 Pikosekunden Dauer bestrahlt werden sollen und zwar mit mehr als 1.000.000 Pulsen pro Sekunde. Unser Kollege Alexander Föhlisch hat zusammen mit internationalen Forschungsgruppen wissenschaftliche Felder identifiziert, in denen BESSY VSR neue Einblicke liefern kann: zum Beispiel bei der Beobachtung von Schaltprozessen in Materialien für eine energieeffiziente Informationstechnologie. Aber auch für die Analyse von chemischen Prozessen in Lösung oder bei der Entwicklung von neuartigen Katalysatoren und vielen anderen unserer Kernthemen.

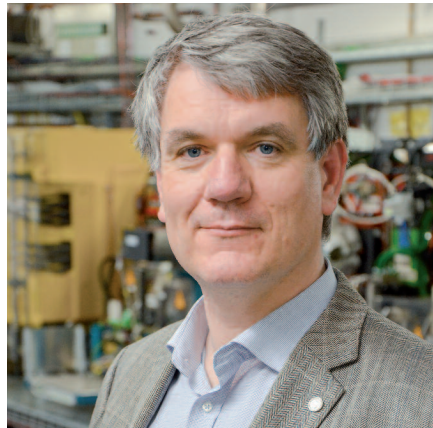
### Wie lange dauerten die Vorarbeiten zu BESSY VSR?

**JK:** Da muss ich etwas ausholen. Seit etwa 15 Jahren haben wir viele kleine Schritte gemacht, die uns jetzt erlauben, den großen Wurf zu realisieren. Zum Beispiel haben wir ab dem Jahr 2000 an einem Konzept für einen Freie-Elektronen-Laser (BESSY FEL) gearbeitet. Dieses Konzept konnte zwar nicht umgesetzt werden, aber wir haben dabei das Metier gelernt und uns weltweit als Experten etabliert. Wir haben einen Teststand für Kavitäten, HoBiCaT, aufgebaut und eine Kryoanlage beschafft, damit wir supraleitende Kavitäten entwickeln können. Erst mit diesen Vorarbeiten und Erfahrungen war es überhaupt möglich, an BESSY VSR zu denken.

### Kavitäten sind ja ganz zentral für BESSY VSR: Können Sie kurz erklären, was Kavitäten sind?

**JK:** Vereinfacht gesagt sind Kavitäten zylinderförmige Metallgehäuse, in denen sich stehende elektromagnetische Wellen bilden, sogenannte Hohlraumresonatoren. Alle Elektronenpakete, die im Speicherring kreisen und Lichtpulse abgeben, durchlaufen diese Kavitäten. Dabei werden sie „in Form“ gebracht (komprimiert) und gewinnen verlorene Energie zurück.

**AJ:** Die erste konkrete Idee, wie man mit supraleitenden Kavitäten noch kürzere Pulse erreichen kann, hatte Gode



Prof. Dr. Andreas Jankowiak leitet das HZB-Institut Beschleunigerphysik. Der Ausbau von BESSY II zu BESSY VSR wurde von langer Hand vorbereitet. Nun geht es in die konkrete Umsetzung – eine Aufgabe, mit der das HZB Neuland betritt.

Wüstefeld. Er hat diese Idee zusammen mit Jörg Feikes und Peter Kuske entwickelt und 2006 auf der Fachkonferenz EPAC 2006 in Edinburgh zur Diskussion gestellt.

**JK:** Wir mussten das damals zurückstellen und haben weiter an BESSY FEL gearbeitet. Letztendlich konnte BESSY FEL nicht finanziert werden. Aber wir hatten durch den Aufbau von HoBiCaT die Chance, in kurzer Zeit bERLinPro zu entwickeln, ein Konzept für einen Beschleuniger mit Energierückgewinnung, der jetzt realisiert wird. Und was das Besondere ist: für bERLinPro müssen wir supraleitende Kavitäten für den Hochstrombetrieb entwickeln. Genau die brauchen wir auch für BESSY VSR. Da ergibt sich also eine sehr willkommene Synergie.

**AJ:** Dazu kam die zweite zündende Idee von Wüstefeld und Kollegen, dass man Kavitäten mit zwei unterschiedlichen Frequenzen in den Ring einbauen kann. Dadurch kommt es zu einer sogenannten Schwebung. Ein Effekt, der auch in der Akustik bekannt ist. Dieser Schwebungseffekt bewirkt, dass die Elektronenpakete unterschiedlich stark komprimiert werden, sodass einerseits viele Pulse mit einer Dauer von 15 Pikosekunden erzeugt werden, andererseits aber auch Pulse, die zehnmal kürzer sind. Damit können die Nutzer wählen, welche Pulsdauer für ihr Experiment ideal ist.

### Wo sehen Sie nun die größten Herausforderungen?

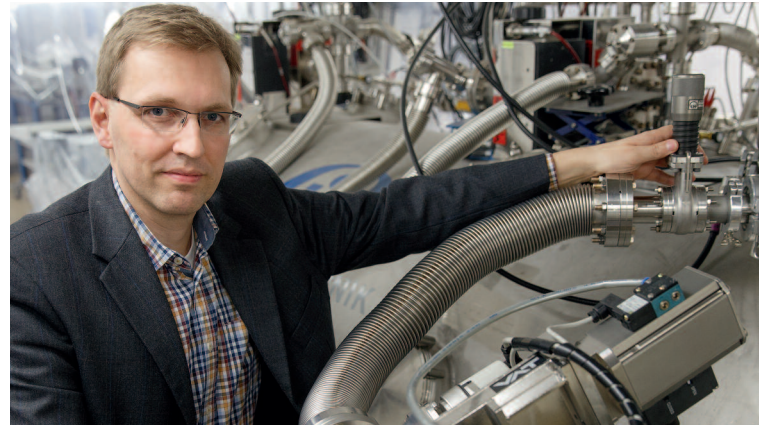
**JK:** Wenn man ein Upgrade für ein Großgerät plant, geht es in der Regel darum, bei einem Parameter um eine Zehnerpotenz besser zu werden. Aber beim Ausbau von BESSY II zu BESSY VSR gibt es nicht nur einen Parameter, den wir deutlich verbessern müssten, sondern mehrere. Das ist wirklich Neuland, und ein bisschen Respekt vor dieser Aufgabe ist da durchaus angesagt.

**AJ:** Vor uns liegen vier oder fünf sehr anstrengende, aber auch höchst spannende Jahre. Denn wir arbeiten an einem funktionierenden Speicherring, und wir müssen beim Umbau darauf achten, dass der Nutzerbetrieb so weit wie möglich aufrecht erhalten werden kann.

### Zehn Jahre sind von der ersten Idee bis zur Bewilligung vergangen. Was motivierte Sie, das Upgrade-Projekt über so einen langen Zeitraum zu verfolgen?

**AJ:** Die wissenschaftliche Community hat uns enormen Rückhalt gegeben. So hat sich das Komitee für Synchrotronstrahlung klar positioniert und gesagt: Ja, das ist der richtige Weg für BESSY, die Idee muss verfolgt werden. Denn BESSY VSR kann kurze hochbrillante Lichtblitze mit einer sehr hohen Repetitionsrate liefern und deckt damit gezielt die Lücke ab, die zwischen den Freie Elektronen Lasern und den Synchrotronquellen der nächsten Generation (Diffraction Limited Synchrotron) klafft.

**JK:** Auch die Unterstützung durch die Geschäftsführung war essentiell. Bevor wir irgendeinen Bewilligungsbescheid hatten, hat die Geschäftsführung Personal für die Entwicklung von BESSY VSR zur Verfügung gestellt.



Prof. Dr. Jens Knobloch, Leiter des HZB-Instituts SRF - Wissenschaft und Technik.

Wir haben Stellen bekommen, um das Konzept im Detail auszuarbeiten, auch mit der Technical Design Studie, so dass BESSY VSR bewilligt werden konnte.

**AJ:** Mit dem Technischen Design-Report haben wir konkrete Lösungsansätze vorgelegt, die von der wissenschaftlichen Gemeinschaft als sehr gut bewertet wurden. Alle verantwortlichen Wissenschaftler an Synchrotronquellen diskutieren, wie diese weiterentwickelt werden sollen. Wir haben eine Antwort für uns gefunden und ein Projekt, das sich realisieren lässt. Darauf können wir alle zusammen stolz sein.

**JK:** Das war und ist ein langer Marsch. Wir haben aber jetzt ein solides Fundament: Wir haben die Infrastruktur und wir haben die Leute mit der notwendigen Expertise.

*Das Gespräch führte Antonia Rötger*

## MIT BESSY VSR AM PULS DER ZEIT

**Die variable Zeitstruktur der Lichtpulse von BESSY VSR (Variabler Pulslängen Speicher Ring) ist für zentrale Fragen der Materialforschung und Chemie spannend. Prof. Dr. Alexander Föhlisch hat in internationalen Workshops gemeinsam mit Expertinnen und Experten vieler Fachrichtungen ausgelotet, wo BESSY VSR neue Einblicke ermöglicht.**

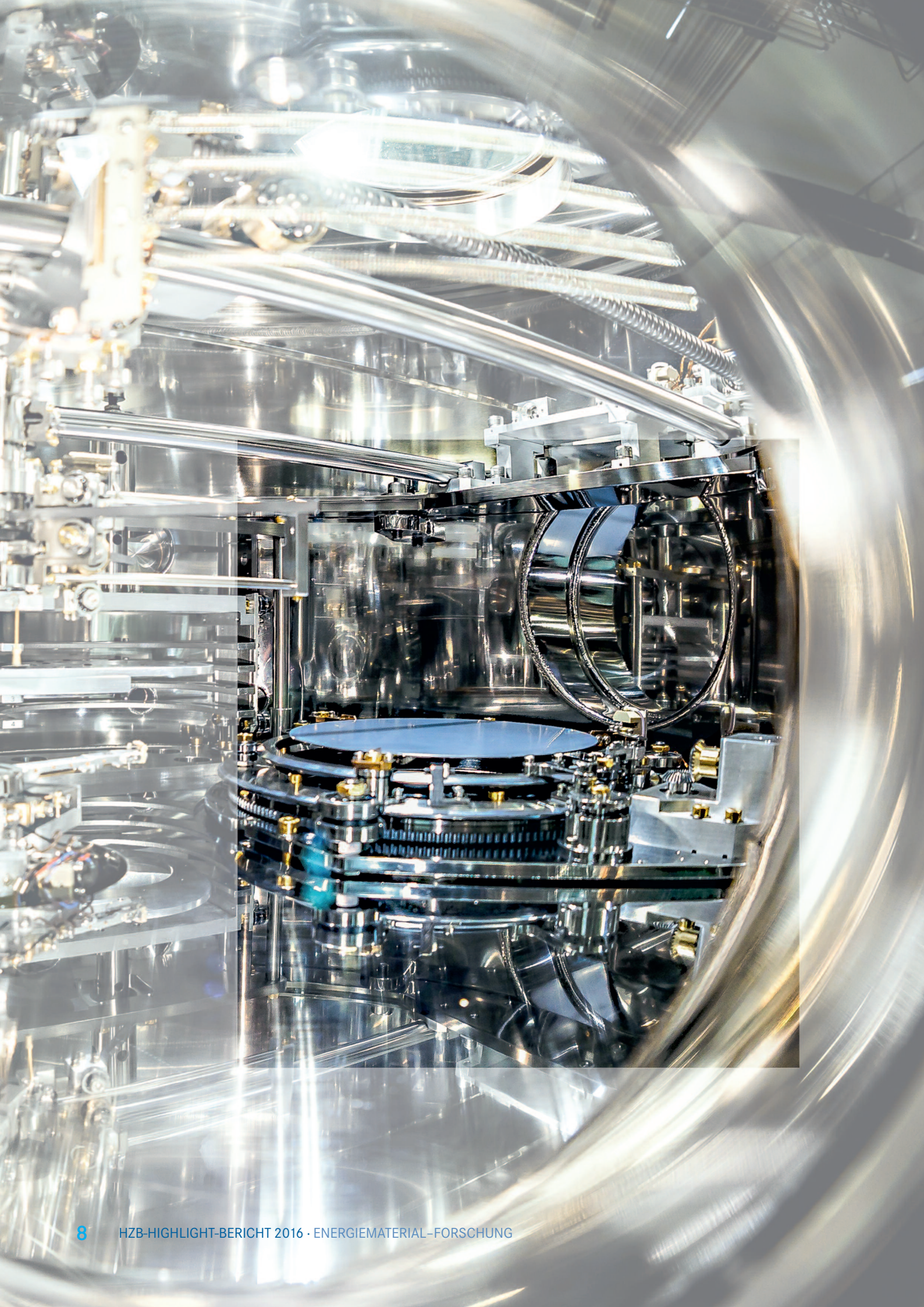
Beschleunigerbasierte Synchrotron-Lichtquellen sind unschlagbar, wenn man für systematische Messungen von Materialeigenschaften sehr helle Pulse braucht und diese zudem äußerst stabil sein müssen. Extrem schnelle dynamische Prozesse lassen sich dagegen besser mit Kurzpulslasern im Femtosekundenbereich untersuchen. BESSY VSR verknüpft nun diese beiden Welten auf einzigartige Weise. BESSY VSR wird sehr helle Pulse mit hoher Stabilität produzieren, die zusätzlich eine Zeitstruktur für Dynamik im Pikosekundenbereich haben. Somit kann nach der zeitunabhängigen Betrachtung sofort die zeitliche Entwicklung von Funktionalität oder chemischen Reaktionen beobachtet werden. Gerade Schaltprozesse in Materialien werden wir sehr genau untersuchen können. Denn diese Prozesse sind

repetitiv, das heißt, sie finden nicht nur einmal statt, sondern laufen immer wieder ab. Deshalb müssen wir zu möglichst vielen Zeitpunkten den jeweiligen Zustand bestimmen, um ein deutliches Bild der Abläufe zu erhalten. Dafür werden die Pikosekundenpulse von BESSY VSR absolut ideal sein.

Das Gleiche gilt für chemische Prozesse. Zwar startet hier häufig alles in den ersten Femtosekunden im einzelnen Molekül, doch verläuft der Reaktionspfad, der Selektivität und Reaktionsrate bestimmt, auf der Pikosekundenzeitskala atomarer Bewegung. Gerade Moleküle in Lösung sind ein Vielteilchensystem: Sie stoßen mit Nachbarn zusammen, geben Energie ab oder nehmen sie auf. Zu dieser Kinetik realitätsnaher Systeme wird VSR tiefe neue Einblicke ermöglichen.

Mit BESSY VSR haben wir wissenschaftlich und technologisch einen Weg beschritten, mit der wir uns auch exponieren. Wir sind stolz darauf, dass wir mit dieser Entwicklung unsere führende Stellung im Bereich der Forschung mit weicher Röntgenstrahlung festigen. Die Finanzierung zeigt das Bekenntnis unserer Zuwendungsgeber zur Innovationskraft des Standorts Berlin. Die Botschaft ist: Hier passieren Entwicklungen, die uns international voranbringen.

*Alexander Föhlisch*





# ENERGIEMATERIAL-FORSCHUNG

Das **Energy Materials In Situ Laboratory (EMIL)** wurde im Oktober 2016 nach drei Jahren Bauzeit vollendet. In dem neuen Laborkomplex, der einen unmittelbaren Zugang zum brillanten Licht des Elektronenspeicherrings BESSY II hat, wollen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler künftig Materialien für die regenerative Energiegewinnung synthetisieren und analysieren. In den Aufbau des Labors wurden circa 20 Millionen Euro investiert.

Das HZB hat im Mai 2016 für sein Projekt **„Atmospheric Cost Competitive Elemental Sulpho-Selenisation for CIGS“ (ACCESS-CIGS)** Fördermittel in Höhe von 800.000 Euro eingeworben. Gemeinsam mit Partnern aus Deutschland und den Niederlanden soll der Herstellungsprozess für CIGS-Dünnschichtsolarzellen weiter optimiert werden. Der am Kompetenz-Zentrum Photovoltaik Berlin (PVcomB) entwickelte Prozess benötigt kein Vakuum, kommt ohne giftige Gase aus und wird günstiger. Die Fördermittel stammen aus der SOLAR-ERA.NET-Initiative.

Das HZB ist Mitglied der im April 2016 gegründeten **Allianz Bauwerkintegrierte Photovoltaik (BIPV)**. Zu den Mitgliedern der Allianz BIPV zählen namhafte Unternehmen, Einrichtungen und Fachleute aus der Bauwirtschaft, der Elektrotechnik und der Energiewirtschaft. Neben Herstellern von Anlagenkomponenten, Architekten und Planern engagieren sich Forschungseinrichtungen, technische Prüfer und Berater in der Allianz BIPV. Damit versteht sich die Allianz BIPV auch als „think tank“ für die Bauwerkintegrierte Photovoltaik.

Das HZB hat sich an dem von Industrie und Forschungsinstituten veröffentlichten **„White Paper for CIGS Thin Film Solar Cell Technology“** beteiligt. 30 namhafte, internationale CIGS-Experten, unter ihnen Prof. Dr. Rutger Schlatmann und Prof. Dr.-Ing. Hans-Werner Schock vom HZB, kommen darin zu dem klaren Ergebnis, dass sich die Investition in eine Solarstromanlage mit CIGS-Dünnschicht-Technologie für den Hauseigentümer auch heute noch lohnt.

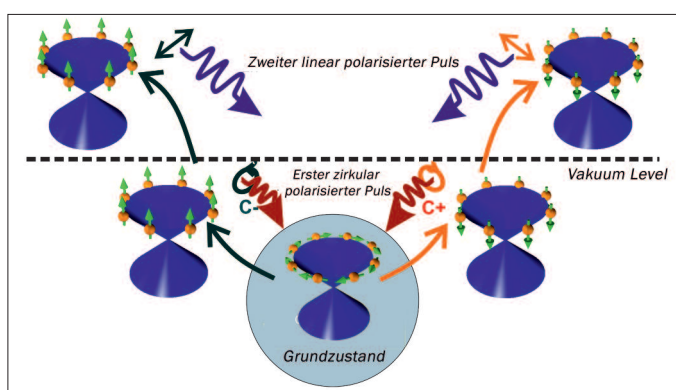
## NEUE ENTWICKLUNGEN IN DER SPINTRONIK

Künftige Informationstechnologien sollen Daten unter geringerem Energieverbrauch verarbeiten und eine deutlich **höhere Datendichte** bieten. Am HZB sind Forschende mit unterschiedlichen Materialien und Methoden diesen Zielen näher gekommen.

**T**opologische Isolatoren zeichnen sich als interessante Materialklasse für die Datenspeicherung der Zukunft dadurch aus, dass ihre Elektronen an der Oberfläche extrem beweglich sind und dass das Material dort leitfähig ist. Im Innern ist es dagegen ein Isolator, dort leitet es keinen Strom. Da Elektronen gleichzeitig auch ein magnetisches Moment tragen (Spin), könnten Topologische Isolatoren auch „spintronische“ Bauelemente ermöglichen: Diese basieren nicht mehr wie Halbleiterbauelemente auf der Bewegung von Ladungsträgern wie Elektronen, sondern auf dem Transport oder der Manipulation ihrer Spins. Um damit zu schalten, wird deutlich weniger Energie benötigt. Nun hat ein internationales Team um den HZB-Physiker Dr. Jaime Sánchez-Barriga gezeigt, wie sich in topologischen Isolatoren die Spins der Elektronen ausrichten und kontrollieren lassen. Am Team waren Experimentatoren vom Berliner Max-Born-Institut, der Lomonosow Universität Moskau und Theoretiker von der LMU München beteiligt. Die Wissenschaftler untersuchten Proben aus dem topologischen Isolator Antimon-Tellurid mit zirkular polarisiertem Laserlicht. Über die „Drehrichtung“ des Laserlichts konnten sie Elektronen-Ströme mit parallel ausgerichteten Spins (spinpolarisiert) gezielt in Gang setzen und lenken. Zudem gelang es ihnen, die Ausrichtung der Spins zu verändern. „Wenn man magnetisch dotierte topologische Isolatoren verwenden würde, könnte man die Spin-Information vermutlich auch speichern“, erklärt apl. Prof. Dr. Oliver Rader, der am HZB die Abteilung für grüne Spintronik leitet. „Um das zu untersuchen und dabei auch insbesondere das dynamische Verhalten der magnetischen Momente zu erkunden, werden ultrakurze Lichtpulse im weichen Röntgenbereich benötigt. Mit dem geplanten Upgrade der Synchrotronquelle BESSY II zu BESSY VSR können solche Experimente in Zukunft zum Standard werden.“

### Graphen auf Halbleitersubstrat als Spintronik-Kandidat

Um Bauelemente für die zukünftige Spintronik zu realisieren, müssen Materialien entwickelt werden, in denen die Spin-Information über lange Strecken erhalten, aber auch manipuliert werden kann. Graphen ist dafür ein guter



Die Skizze zeigt die charakteristische Spin-Ausrichtung (Pfeile) von Elektronen in einem topologischen Isolator (unten). Ein zirkular polarisierter Laserpuls dreht die Spins aus der Oberflächenebene der Probe heraus (Mitte). Dies lässt sich mit einem linear polarisierten zweiten Puls nachweisen (oben).

Kandidat: In Graphen, einer Modifikation von Kohlenstoff, können sich Elektronen über weite Strecken bewegen, ohne dass deren Spins ihre Ausrichtung verlieren. Auch gezielte Spin-Manipulationen sind darin möglich. Dies zeigten die HZB-Physiker Dr. Andrei Varykhalov und Dr. Dmitry Marchenko bereits vor einigen Jahren, als sie Graphen mit Goldatomen dotierten und beobachteten, wie sich dadurch Spins ausrichten.

Dieses Ergebnis hat zu einigen Durchbrüchen geführt, die bislang jedoch einen Haken hatten: Die Unterlage, auf der die Graphenschicht abgeschieden wurde, war metallisch. Die Gold-Atome wurden zwischen Graphen und einer Unterlage aus Nickel eingeschleust. Dadurch erhöhte sich die sogenannte Spin-Bahn-Wechselwirkung um den Faktor 10.000. Für einen Effekt dieser Größe weiß man aus Berechnungen, dass sich die Spins der Elektronen systematisch drehen: alle 40 Nanometer um 180 Grad. Dennoch war es nicht möglich, mit den Spins Informationen zu übertragen. Da die Unterlage (Nickel) elektrisch leitfähig ist, fließen gleichzeitig viele Elektronen mit ungeordneten Spins. Wegen dieses „Kurzschlusses“ lässt sich der Effekt auf Nickel-Substraten nicht nutzen.

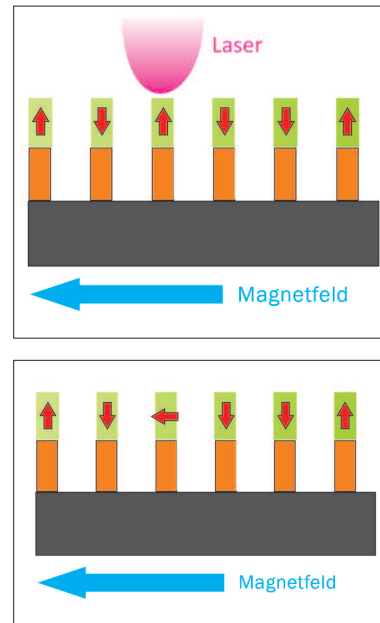
Dies gelang den beiden HZB-Forschern nun in Graphen, das diesmal auf Siliziumcarbid, einem halbleitenden Substrat, abgeschieden wurde. Die Herausforderung war hier, beim Einschleusen der Goldatome eine gleichmäßige Verteilung zu erreichen. Denn in Bereichen mit nur wenigen Goldatomen lädt sich das Graphen negativ auf; in Bereichen mit mehr Goldatomen lädt es sich positiv auf und wird zum Lochleiter. „Es war ausgesprochen schwierig“, erinnert sich Marchenko, Erstautor der Arbeit, „Proben mit ausschließlich positiver Dotierung herzustellen“. Schließlich konnte er eine rein positive Probe mit spinaufgelöster Photoelektronen-Spektroskopie an BESSY II untersuchen.

Das Gold-dotierte Graphen auf Siliziumcarbid zeigte dabei ein anderes Verhalten als auf Metall-Substraten. Die Erhöhung der Spin-Bahn-Kopplung um vier Größenordnungen tritt hier nur in der Nähe von bestimmten „Hot Spots“ auf: nämlich dort, wo sich die Energieniveaus von Graphen und Gold treffen. Damit sich diese hohe Spin-Bahn-Wechselwirkung nutzen lässt, um Spins tatsächlich zu transportieren, müsste man das Graphen demnach mit einem zweiten Element positiv dotieren oder eine zusätzliche Gate-Spannung anlegen, die diese „Hot Spots“ energetisch auf die Fermi-Energie anhebt. „Eine kleine Spannung würde schon ausreichen, um Spin-Effekte an- oder auszuschalten“, sagt Marchenko.

### Effizientes Materialsystem für die wärmeunterstützte Datenspeicherung

Für neuartige Speichermedien mit deutlich höheren Datendichten sucht die Industrie nach Materialsystemen, in denen sich nanometergroße Bereiche noch stabil magnetisieren lassen. Um solche winzigen Regionen mit neuen Informationen zu überschreiben, müssen sie mit einem Laser lokal über die Curie-Temperatur hinaus erhitzt werden, die typischerweise bei mehreren hundert Grad Celsius liegt. Nach dem Abkühlen lässt sich die Region durch ein kleines externes Feld wieder neu ausrichten. Das Verfahren ist als wärmeunterstützte magnetische Aufzeichnung oder Heat Assisted Magnetic Recording (HAMR) bekannt. In der Industrieforschung arbeitet man bereits an Verbindungen aus Eisen und Platin für HAMR-Datenspeicher.

Dr. Jaime Sánchez-Barriga und sein Team haben ein neues Materialsystem aus Dysprosium und Kobalt untersucht, das gleich mehrere Vorteile verspricht: deutlich niedrigere Schreibtemperatur, höhere Stabilität der magnetischen Bits und bessere Kontrolle der Spin-Ausrichtung in den einzelnen magnetischen Bits. Sie sputterten dafür einen extrem dünnen Film aus  $\text{DyCo}_5$  über einer nanostrukturierten Membran auf, die von Kooperationspartnern des Instituts für Materialwissenschaften in Madrid hergestellt wurde. Diese besitzt Poren mit Durchmessern von 68 Nanometern, die in einem Wabenmuster im Abstand von 105 Nanometern angeordnet sind. Die Nanoporen wirken als Haftstellen für die magnetischen Domänen und stabilisieren sie.



Auf der nanostrukturierten Membran liegt eine extrem dünne Schicht aus Dysprosium-Kobalt (grün). Die magnetischen Momente des  $\text{DyCo}_5$ -Films ragen senkrecht aus der Ebene heraus. Durch ein äußeres Magnetfeld lassen sie sich nicht umorientieren, Daten sind so stabil gespeichert. Mit einem Laser könnte ein einzelnes Bit lokal erwärmt werden. Dabei genügt eine Erwärmung auf nur ca 80 Grad Celsius, um das magnetische Moment in die Ebene zu kippen. Nach dem Abkühlen bleibt dieses Moment in der Ebene, bis es durch einen Schreibkopf neu ausgerichtet wird.

Die magnetischen Momente sind senkrecht zur Ebene ausgerichtet und stabil gegenüber äußeren Magnetfeldern, lassen sich also nicht einfach überschreiben. Die Wissenschaftler zeigten, dass in diesem System eine Erwärmung auf nur 80 Grad Celsius ausreicht, um die lokalen magnetischen Momente um 90 Grad zu kippen, so dass sie parallel zur Ebene ausgerichtet sind. Mit Messungen am PEEM und am XMCD-Messplatz konnte die Gruppe die lokale Ausrichtung der magnetischen Signale vor, während und nach der Erwärmung präzise kartieren. Nach dem Abkühlen lassen sich die magnetischen Domänen mit einem magnetischen Schreibkopf neu überschreiben. „Dieser Prozess ist in  $\text{DyCo}_5$  sehr energieeffizient und schnell“, stellt Dr. Florin Radu, Koautor der Studie, fest. „Unsere Ergebnisse zeigen, dass es alternative HAMR-Kandidaten gibt, die für die Datenspeicherung deutlich weniger Energie benötigen und außerdem weitere Vorteile besitzen“, sagt Sánchez-Barriga. arö

Phys. Rev. B 93, 155426 (DOI: 10.1103/PhysRevB.93.155426): Ultrafast spin-polarization control of Dirac fermions in topological insulators; J. Sánchez-Barriga, E. Golias, A. Varykhalov, J. Braun, L. V. Yashina, R. Schumann, J. Minár, H. Ebert, O. Kornilov and O. Rader

Appl. Phys. Lett. 108, 172405, 2016 (DOI: 10.1063/1.4947286): Rashba splitting of 100 meV in Au-intercalated graphene on SiC; D. Marchenko, A. Varykhalov, J. Sánchez-Barriga, Th. Seyller and O. Rader.

Phys. Rev. Applied 5, 064007 (DOI: 10.1103/PhysRevApplied.5.064007): Ferrimagnetic  $\text{DyCo}_5$  Nanostructures for Bits in Heat-Assisted Magnetic Recording; A. A. Ünal, S. Valencia, F. Radu, D. Marchenko, K. J. Merazzo, M. Vázquez and J. Sánchez-Barriga

## LOKALE MAGNETISCHE MONOPOLE

Ein internationales Team hat an BESSY II einen neuen Weg gefunden, um exotische magnetische Muster wie **Monopole oder Wirbel** in einer dünnen magnetischen Schicht zu erzeugen. Dies eröffnet neue Möglichkeiten für schnelle und energieeffiziente Datenspeicher.

**M**agnetische Muster wie Wirbel (Skyrmionen) oder Monopole eignen sich, um Daten schneller und mit weniger Energieeinsatz zu speichern. Bisher ist es jedoch schwierig, solche magnetischen Strukturen kontrolliert in einem Material zu erzeugen und zu steuern. Nun hat ein HZB-Team um Dr. Sergio Valencia in Kooperation mit einer Gruppe am Institut für Materialwissenschaften in Barcelona einen Weg aufgezeigt, um dies zu leisten. Die spanischen Kooperationspartner haben Mikrostrukturen hergestellt, indem sie auf eine Trägerschicht winzige Punkte aus dem Hochtemperatur-Supraleiter Yttrium-Barium-Kupferoxid (YBaCuO) aufbrachten. Dabei stellten sie Proben mit jeweils unterschiedlich angeordneten Punkten her. Valencia und sein Team bedeckten diese Mikrostrukturen mit einem extrem dünnen Film aus einer weichmagnetischen Eisen-Nickel-Legierung.

Die Experimente fanden bei 50 Grad Kelvin (minus 223 Grad Celsius) statt, sodass die YBaCuO-Punkte supraleitend waren. Senkrecht zur Probe legte das Team kurzfristig ein kleines äußeres Magnetfeld an. Dieses Magnetfeld erzeugt innerhalb der YBaCuO-Punkte supraleitende Ring-Ströme. Auch nach dem Abschalten des äußeren Magnetfelds laufen diese Ströme in den supraleitenden Punkten weiter und erzeugen ein komplexes magnetisches Feld, das sich direkt auf die darüber liegende magnetische Dünnschicht auswirkt.

Auf diese Weise lassen sich magnetische Muster in die Dünnschicht einschreiben, in denen zum Beispiel alle magnetischen Domänen aufeinander zu oder voneinander weg zeigen. Dies entspricht einem magnetischen Monopol. Das Team um Valencia konnte die magnetischen Domänen mit der Methode der Röntgen-Photo-Elektronen-Emissionsmikroskopie (X-PEEM und XMCD) an BESSY II kartieren. Das Verfahren bildet ausschließlich die Domänen innerhalb des magnetischen Eisen-Nickel-Films ab.

Auch theoretische Simulationen belegen, dass die magnetischen Muster in der Dünnschicht über die Wechselwirkung mit den supraleitenden Bereichen erzeugt werden. Durch die Form der supraleitenden Bereiche und ihrer Abstände zueinander lässt sich eine Vielzahl an exotischen magnetischen Mustern erzeugen, darunter auch stabile Wirbel, sogenannte Skyrmionen. „Ich bin sehr optimistisch, dass sich diese Muster weiter miniaturisieren lassen. Damit könnte dieses Materialsystem ein Kandidat für künftige magnetische Datenspeicher werden. Außerdem gibt es jetzt schon Ideen dafür, wie es gelingen könnte, solche Materialsysteme auch bei Raumtemperatur zu nutzen“, sagt Valencia. *arö*

Advanced Science, Open Access (DOI: 10.1002/adv.201600207):  
Encoding Magnetic States in Monopole-Like Configurations Using Superconducting Dots, A. Palau et. al.

### LADUNGSDICHTEWELLE TROTZ SUPRALEITUNG STABIL

Hochtemperatursupraleiter sind besondere Metalloxid-Verbindungen, die Strom ohne Energieverlust leiten können. Anders als konventionelle Supraleiter müssen sie dafür nicht bis nahe an den absoluten Temperatur-Nullpunkt gekühlt werden. Vielmehr schaffen sie dies bei vergleichsweise hohen Temperaturen. Ein typischer Hochtemperatursupraleiter ist Yttrium-Barium-Kupferoxid (YBaCuO) mit einer Sprungtemperatur von 92 Kelvin (minus 181 Grad Celsius). Das Kühlen mit flüssigem Stickstoff reicht aus, um diese Temperatur zu unterschreiten. Ein Team um Prof. Dr. Bernhard Keimer vom MPI für Festkörperforschung in Stuttgart und Dr. Eugen Weschke vom HZB haben nun in einem System aus dünnen YBaCuO- sowie ferromagnetischen Nanoschichten entdeckt, wie sich Valenzelektronen verschieben lassen. Mit resonanter Röntgenstreuung haben sie an BESSY II die Grenzflächen zwischen den ferromagnetischen und supraleitenden Schichten untersucht. Alex Frano konnte in seiner Doktorarbeit nachweisen, dass sich dabei die Valenzelektronen in den Kupferatomen der YBaCuO-Dünnschicht minimal verschieben. Das führt zu sogenannten Ladungsdichtewellen in der YBaCuO-Schicht, und zwar nicht nur in der unmittelbaren Nähe der Grenzflächen, sondern über die gesamte Dicke der Schicht. „Das ist erstaunlich, weil frühere Untersuchungen gezeigt hatten, dass Supraleitung die Ausbildung von Ladungsdichtewellen

unterdrückt“, erklärt Frano. „Indem wir die Grenzflächen in die Heterostrukturen gebracht haben, ist es gelungen, die Ladungsdichtewellen in Gegenwart der Supraleitung zu stabilisieren“, erläutert Eugen Weschke. Die YBaCuO-Schichten bleiben supraleitend, obwohl sich gleichzeitig die Ladungsdichten periodisch ändern. „Wie genau diese Koexistenz auf mikroskopischer Skala aussieht, ist eine spannende Frage, die mit weiteren Experimenten untersucht werden muss“, so der HZB-Forscher. Besonders interessant wäre es, herauszufinden, ob man über diesen Mechanismus und durch weiteres geschicktes Design der Grenzflächen den supraleitenden Zustand gezielt kontrollieren kann. *arö*

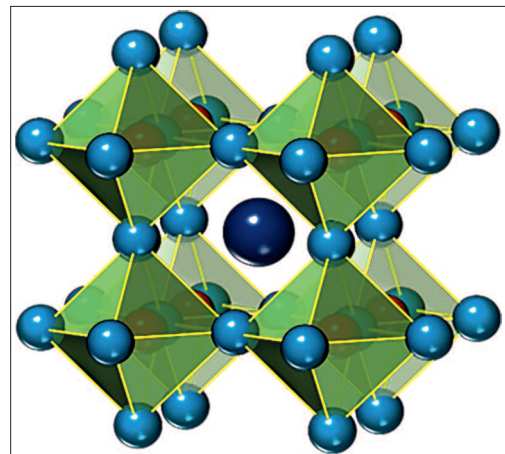
Nat. Mat. 15, 2016 (DOI:10.1038/nmat4682): Long-range charge-density-wave proximity effect at cuprate/manganate interfaces, A. Frano et. al.

## LASERINDUZIERTES UMSCHALTEN VON BITS

Ein internationales Team hat an BESSY II eine neue Möglichkeit entdeckt, wie sich die Energiebarriere in einem magnetischen Material überwinden lässt. Damit könnte die **Informationsdichte in Speichermedien** künftig weiter erhöht werden.

Die Speicherkapazität von Festplatten ist stetig gewachsen. Nun kommt sie an Grenzen, denn je kleiner die magnetischen Bit-Einheiten werden, desto instabiler werden sie, sodass die gespeicherte Information mit der Zeit verloren geht. Dabei gibt es bereits stabilere magnetische Materialien. Das Problem: Die magnetischen Bereiche in diesen Materialien sind so fix, dass sie mit dem Schreibkopf nicht mehr umgeschaltet werden können. Techniken wie das Heat Assisted Magnetic Recording erhitzen dann lokal den Bereich um die magnetische Informationseinheit (Bit). Die Wärme bringt das System sozusagen über die Energiebarriere, sodass sich das magnetische Bit umschalten lässt. Nach der Abkühlung ist es wieder stabil. Eine internationale Kooperation hat nun einen völlig neuen Ansatz vorgestellt, um die Energiebarriere in einem magnetischen Material zu überwinden. Die Forscher senken die Barriere für die magnetische Manipulation, indem sie einen Phasenübergang im Material hervorrufen, vom isolierenden zum metallischen Zustand. Das Team, das von Prof. Hiroki Wadati von der Universität Tokio geleitet wird, hat das Material  $\text{BaFeO}_3$  (BFO) mit ultrakurzen Röntgenpulsen am FemtospeX-Messplatz der Photonquelle BESSY II untersucht. BFO ist ein ferromagnetischer Isolator mit einer stabilen magnetischen Ordnung. Wenn man das Material aber mit Laserpulsen oberhalb einer bestimmten Schwellenleistung beschießt, lässt sich dessen magnetische Ordnung auf einmal leicht manipulieren.

Die Forscher konnten den Schwellenwert für das magnetische Umschalten ermitteln und zeigen, dass sich dabei ein Übergangszustand im Material bildet: Kurzfristig wird der Isolator BFO metallisch. Anders als in üblichen magnetischen Materialien, wo Laser-Anregung einen quasi-metallischen



Das ferromagnetische Material  $\text{BaFeO}_3$  (BFO), das mit kurzen Laserpulsen beschossen wurde, hat eine Perowskit-Kristallstruktur.

Zustand nur für weniger als ein Billionstel einer Sekunde herbeiführt, stabilisiert sich in BFO der metallische Zustand selbst. Er bleibt dadurch etwa Tausend Mal länger erhalten und besteht damit lange genug, um in dieser Zeit Bits mit einem kurzen Magnetfeldpuls zu schreiben. Dadurch ist der Effekt für technische Anwendungen interessant.

Die Ergebnisse zeigen einen neuen Weg auf, um Daten zu manipulieren. Solch ein umfassendes Bild von ultraschnellen Prozessen in einem Material zu erhalten war möglich, weil der FemtospeX-Messplatz es erlaubt, magnetische und spektroskopische Informationen in ein und demselben Experiment zu gewinnen. *red/arö*

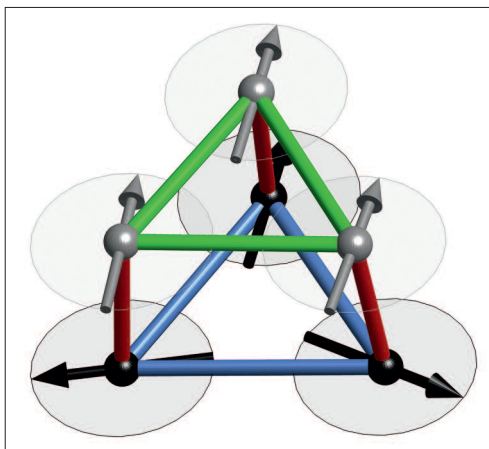
Phys. Rev. Lett. 116, 256402 (DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.256402): Photoinduced Demagnetization and Insulator-to-Metal Transition in Ferromagnetic Insulating  $\text{BaFeO}_3$  Thin Films. T. Tsuyama et. al.

## „FLÜSSIGE“ QUANTENSPINS BEOBACHTET

Ein Team am HZB hat experimentell eine sogenannte **Quanten-Spinflüssigkeit** in einem Einkristall aus Kalzium-Chrom-Oxid nachgewiesen. Dabei handelt es sich um einen neuartigen Materiezustand, der für die Entwicklung von Quantencomputern von Bedeutung sein könnte.

Es entspricht unserer alltäglichen Erfahrung, dass Materie bei tiefen Temperaturen gefriert, und die Atome eine feste, regelmäßige Struktur bilden. Auch in magnetischen Materialien kommen die Spins, die magnetischen Momente der Elektronen, bei sinkenden Temperaturen zur Ruhe und richten sich starr aus. Allerdings gibt es seltene Ausnahmen: In sogenannten Quanten-Spinflüssigkeiten bleiben die Spins selbst bei Temperaturen nahe dem absoluten Nullpunkt beweglich. Nach bisherigem Verständnis

Ein Ausschnitt aus dem Kristallgitter der Probe verdeutlicht, dass die Spins widersprüchlichen Anforderungen ausgesetzt sind. Die grünen und roten Balken zwischen Gitterplätzen symbolisieren ferromagnetische Wechselwirkungen. Die blauen Balken dagegen antiferromagnetische.



sind dafür antiferromagnetische Wechselwirkungen zwischen den Spins verantwortlich, die die Spins antiparallel ausrichten. So können sich die Spins an den Ecken eines Dreiecks nicht zu beiden Nachbaratomen gleichzeitig antiparallel (antiferromagnetische Kopplung) ausrichten. Diese „Frustration“ sorgt dafür, dass die Spins selbst am absoluten Nullpunkt nicht zur Ruhe kommen und wie in einer Flüssigkeit beweglich bleiben. Die parallele Ausrichtung (ferromagnetische Kopplung) ist dagegen immer gut möglich. Entsprechend kamen bislang nur wenige Materialien für Spinflüssigkeiten in Frage.

Nun hat ein HZB-Team um Prof. Dr. Bella Lake erstmalig am HZB Einkristalle aus Kalzium-Chrom-Oxid ( $\text{Ca}_{10}\text{Cr}_7\text{O}_{28}$ ) hergestellt und untersucht. Kalzium-Chrom-Oxid ist aus sogenannten Kagomé-Gittern aufgebaut, die an japanische

Flechtmuster aus Dreiecken und Sechsecken erinnern. Dabei bildet sich in Kalzium-Chrom-Oxid ein komplexes Set an magnetischen Wechselwirkungen: So gibt es nicht nur antiferromagnetische Kopplungen, sondern auch sehr starke ferromagnetische Wechselwirkungen, die nach dem gängigen Modell eine Spinflüssigkeit verhindern müssten. Experimente an verschiedenen Neutronenquellen zeigen jedoch, dass die Spins in diesen Proben auch noch bei tiefsten Temperaturen von 20 Millikelvin hochbeweglich bleiben. Auch Myonen-Spektroskopie-Messungen am Paul-Scherrer-Institut in der Schweiz belegen, dass sich die Spins in diesem Kristall wie eine Flüssigkeit verhalten. Bei diesem Verfahren nutzen Forscher Myonen – instabile Elementarteilchen – um Vorgänge in Materialien zu untersuchen. Insbesondere lassen sich damit Magnetfelder im Inneren eines Materials vermessen. In Europa können Myonen-Spektroskopie-Messungen nur an zwei Forschungszentren durchgeführt werden.

### Mehr Kandidaten für Spin-Flüssigkeiten

Prof. Dr. Johannes Reuther, Experte für theoretische Physik am HZB, konnte mit Hilfe dieser experimentellen Hinweise das Bild von Spinflüssigkeiten erweitern. Mit numerischen Simulationen zeigte er, wie die verschiedenen magnetischen Kopplungen in Kalzium-Chrom-Oxid miteinander konkurrieren und die Spins in dynamischer Bewegung halten. „Wir haben experimentell nachgewiesen, dass interessante Quantenzustände wie Spinflüssigkeiten auch in deutlich komplexeren Kristallen mit unterschiedlichen magnetischen Wechselwirkungen auftreten können“, sagt Dr. Christian Balz, Erstautor der Arbeit. Und Bella Lake erklärt: „Die Arbeit erweitert nicht nur das Verständnis von kristalliner Materie, sondern zeigt auch, dass es sehr viel mehr Kandidaten für Spinflüssigkeiten gibt, als erwartet. Dies könnte in Zukunft für die Entwicklung von Quantencomputern interessant sein, denn Spinflüssigkeiten gelten als mögliche Bausteine für kleinste Informationseinheiten, die sogenannten Qubits.“ *arXiv*

Nature Physics 12, 942–949, 2016 (DOI: 10.1038/nphys3826): Physical realization of a quantum spin liquid based on a novel frustration mechanism, C. Balz et. al.

## NACHWEIS EINER MULDE

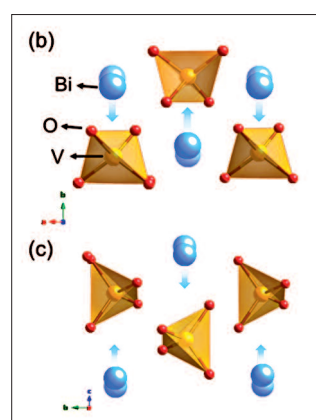
Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler des HZB haben den Weg der Ladungsträger in einem **lichtabsorbierenden Material** zur Wasserstoffproduktion verfolgt. Ihre Erkenntnisse eröffnen eine Möglichkeit zur Verbesserung dieses wichtigen Prozesses für die umweltfreundliche Energiegewinnung.

Wasser mit Hilfe von Sonnenlicht zu spalten und den so erzeugten Wasserstoff als Brennstoff zu verwenden oder andere Treibstoffe damit herzustellen – diese Idee klingt faszinierend. Allerdings treten in der Praxis Probleme auf, die sich am ehesten lösen lassen, wenn man den Weg der elektrischen Ladungen möglichst gut kennt, die das Sonnenlicht in einem geeigneten Material erzeugt. Genau diese Wege untersucht HZB-Forscher Dr. Rainer Eichberger mit sehr kurzen Laser-Blitzen.

Schon heute zerlegt Sonnenlicht mit Hilfe bestimmter Materialien wie einer Tandemzelle aus Gallium-Indium-Phosphid und Gallium-Indium-Arsenid Wasser mit Wirkungsgraden von circa 14 Prozent in seine Bestandteile Wasserstoff und Sauerstoff. Praxistauglich aber sind diese Werkstoffe nicht, weil sie mit der Zeit korrodieren und so unbrauchbar werden. Eine Tandem-Siliziumzelle mit einer Auflage aus Wismut-Vanadat, die für die Wasserspaltung zuständig ist, bringt es dagegen auf gerade einmal fünf Prozent Wirkungsgrad. Das klingt auf den ersten Blick dürftig, bietet aber einen Vorteil: Wismut-Vanadat ist bereits korrodiert und hält daher deutlich länger. Vermutlich kann man die Eigenschaft dieser oder ähnlicher Substanzen deutlich verbessern, sobald man genauer versteht, wie die Ladungen darin wandern.

### Wie eine Kugel auf einem gespannten Tuch

Diese Ladungen entstehen, wenn in Halbleiter-Materialien Lichtteilchen ein Elektron aus seinem Verband ausschlagen. Neben dem elektrisch negativ geladenen Elektron entsteht dabei eine positive Ladung, die Halbleiter-Forscher als „Loch“ bezeichnen. Unabhängig voneinander wandern Loch und Elektron dann durch den Kristall und erreichen im Idealfall auch die Oberfläche, an der sie Wasser spalten können. Allerdings verlieren sie auf diesem Weg erheblich an Tempo. Dieser Geschwindigkeitsverlust lässt sich mit einer Polarisation erklären: Das elektrisch negativ geladene Elektron zieht positiv geladene Atom-Rümpfe ein wenig an und verformt so den Kristall ein wenig. Diese gegenseitigen Anziehungskräfte bremsen das Elektron und es entsteht ein „Quasiteilchen“ aus diesem Elektron und den angezogenen positiv geladenen Stellen. „Man kann sich diesen Vorgang wie eine Kugel



Das Sonnenlicht erzeugt in Wismut-Vanadat Ladungsträger, die an der Oberfläche des Materials Wasser in den Energieträger Wasserstoff und in Sauerstoff spalten können. Allerdings bleiben die Ladungsträger in „Mulden“ hängen und können ihren Weg erst fortsetzen, wenn die natürlichen Schwingungen der Wismut-Atome (blau) und der Vanadat-Teilchen (orange) sie wieder herausstupsen.

auf einem gespannten Tuch vorstellen“, erklärt Eichberger: „Ähnlich wie die Kugel eine kleine Mulde ins Netz drückt, in der sie liegen bleibt, schafft ein Elektron oder ein Loch eine Mulde im Potential, das sogenannte ‚Polaron‘“. Bei Raumtemperatur schwingen die Strukturen des Halbleiter-Kristalls eifrig hin und her und können dabei ein wenig Energie auf das Polaron übertragen und so das Elektron aus seiner Mulde herausstupsen. Mit einem Femtosekunden-Laser konnte Eichberger nun die Zeit für dieses Hängenbleiben in der Potentialmulde messen und lieferte damit den ersten direkten Nachweis eines Polarons. Sogar die Energie konnte der Forscher bestimmen, die den Ladungsträger wieder aus seinem Loch herauschubst. Damit aber hat Eichberger die Tür zu einer Verbesserung der Wasserspaltung ein wenig weiter geöffnet. Wissen die Forscher, wie die Ladungsträger sich verhalten, können sie gezielt nach Materialien suchen, in denen diese Ladungsträger effektiver an die Oberfläche gelangen. Diesen Transport können sie unter Umständen auch verbessern, wenn sie die Struktur vorhandener Materialien durch das Einbringen geringer Mengen anderer Substanzen verändern, was im Fachjargon „Dotieren“ genannt wird. rk

ACS Energy Letters 2016, 1, 888–894 (DOI: 10.1021/acsenenergylett.6b00423): Direct Time-Resolved Observation of Carrier Trapping and Polaron Conductivity in  $\text{BiVO}_4$ ; M. Ziwiritsch et. al.

## WIE DEFEKTE IN CIGSE-ZELLEN ENTSTEHEN UND VERSCHWINDEN

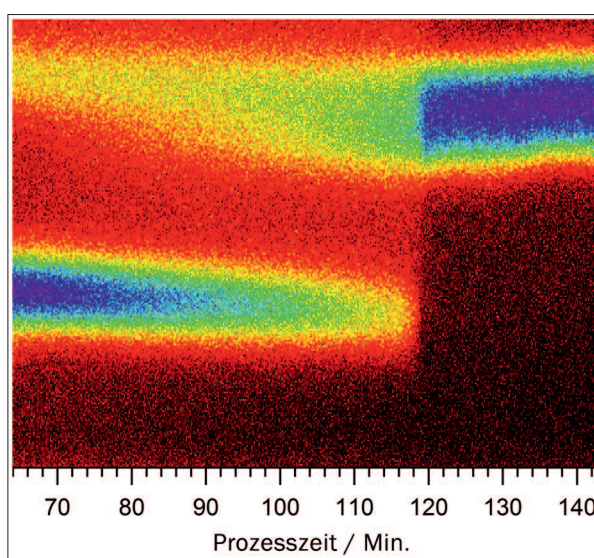
Ein internationales Forschungskonsortium hat die komplexen Prozesse bei der **Abscheidung von Chalkopyrit-Dünnschichten** untersucht. An BESSY II konnten Forschende beobachten, wann sich während der Deposition bestimmte Defekte bilden und unter welchen Umständen sie wieder ausheilen.

Unter den polykristallinen Dünnschicht-Solarzelltypen erreichen Solarzellen aus Kupfer, Indium, Gallium und Selen, kurz CIGSe, die höchsten Wirkungsgrade. Die vier Elemente werden über Dampfphasen zusammen abgeschieden, so dass sie in Form von winzigen Chalkopyrit-Kristallen auf einem Substrat eine sehr dünne Schicht bilden. Dies ist ein überaus komplexer Prozess, der von vielen Parametern gesteuert wird. Daher erreichen CIGSe-Module in industriüblichen Formaten noch nicht die Rekordwirkungsgrade, die bereits im Labormaßstab demonstriert werden. Eine Ursache: Im Verlauf der Herstellung können sich Defekte ausbilden, die den Wirkungsgrad reduzieren.

Eine Kooperation aus deutschen, israelischen und britischen Teams hat nun eingehend untersucht, wie der Herstellungsweg die Qualität der Mikrostruktur beeinflusst. An der Synchrotronquelle BESSY II konnten die Forscher erstmals mit *in situ*-Röntgen-Diffraktion und Fluoreszenzanalyse beobachten, wann sich während der Deposition Defekte bilden und unter welchen Umständen sie ausheilen.

### Abscheidungsprozesse verbessern

Das Abscheiden von dünnen CIGSe-Filmen ist ein komplexer Prozess: Zunächst werden Indium, Gallium und Selen auf dem Substrat deponiert. Im zweiten Schritt folgt die Deposition von Kupfer- und Selenatomen, die in die In-Ga-Se-Schicht einwandern. Dort entstehen winzige CIGSe-Kristallite mit Chalkopyrit-Struktur. Der Kupferanteil erreicht erst im Laufe des zweiten Schritts das richtige Maß. Die „kupferarme“ Phase davor ist durch zahlreiche Defekte innerhalb der Kristallite gekennzeichnet. Durch die Zugabe von Kupfer und Selen verschwinden diese Defekte zunehmend. Werden nach dem Erreichen der „richtigen Stöchiometrie“ noch Kupfer und Selen zugegeben, dann passen diese Elemente nicht mehr in die vorhandenen Kristallmatrizen hinein und lagern sich in und auf der polykristallinen CIGSe-Schicht als „Körner“ ab. Eigentlich ist dies lästig, denn die Körner müssen im Anschluss wieder aufwendig entfernt werden. Doch offenbar haben sie eine wichtige Funktion für das fast vollständige Verschwinden der Defekte.



Die Messergebnisse (Photonenenergie versus Zeit) belegen Defekte (unteres Signal), die nach etwa 120 Minuten rasch verschwinden. Dies entspricht dem Übergang von der kupferarmen Phase in die kupferreiche Phase.

Dr. Roland Mainz und seine Kollegen vom HZB konnten an der EDDI-Beamline von BESSY II mit Röntgendiffraktion die Strukturveränderungen während der Deposition beobachten – in Echtzeit. Dabei analysierten sie mit Röntgenfluoreszenzanalyse die elementare Zusammensetzung der entstandenen Dünnschicht. Die gleichzeitige Beobachtung mit zwei Methoden ermöglichte ihnen neue Einblicke: „Die Vermeidung der Defekte erfolgt sehr schnell, sobald sich Kupferselen-Körner an der Oberfläche des CIGSe-Filmes ablagern, und wir in die kupferreiche Phase eintreten. Bisher haben wir die kupferreiche Phase nur als wichtig für das Wachsen der Körner verstanden. Nun wissen wir, dass sie auch eine große Rolle beim Abbau der Defekte spielt“, erklärt Mainz.

Helena Stange, Koautorin der Studie, hat den Einfluss der verschiedenen Defekttypen auf die Diffraktionssignale simuliert. Die *in situ*-Beobachtungen passen sehr gut zu den Simulationen und zu den Ergebnissen, die aus den



unterschiedlichen bildgebenden Verfahren entstanden sind, mit denen Teams am Max-Planck-Institut für Festkörperforschung in Stuttgart, am SuperSTEM Lab in Daresbury, England oder am Racah Institut, Jerusalem, die Proben in verschiedenen Stadien der Deposition untersucht hatten. Ein weiteres wichtiges Ergebnis ist, dass die Temperatur während der Deposition ein verhältnismäßig unkritischer Parameter für den Defektabbau ist: Ob der Vorgang bei 400 Grad Celsius oder 530 Grad stattfindet, ist unerheblich,

sobald die Schicht kupferreich wird. Auch dies hilft dabei, Verfahren für die großflächige Deposition zu optimieren. Die Kooperation läuft im Rahmen des Helmholtz Virtuellen Instituts „Microstructures control for thin film solarcells“, das seit 2012 und noch bis 2018 gefördert wird. arö

Energy Environ. Sci., 2016, 9, 1818-1827 (DOI: DOI: 10.1039/C6EE00402D): Annihilation of structural defects in chalcogenide absorber films for high-efficiency solar cells; R. Mainz et. al.

## SCHUTZSCHICHT FÜR DAS „KÜNSTLICHE BLATT“

Ein Team am HZB-Institut für Solare Brennstoffe hat ein Verfahren entwickelt, um empfindliche Halbleiter für die **solare Wasserspaltung** mit einer organischen transparenten Schutzschicht zu versehen. Das erhöht die Effizienz dieser sogenannten künstlichen Blätter erheblich.

**E**in „Künstliches Blatt“ besteht im Prinzip aus einer Solarzelle, die mit weiteren funktionalen Schichten kombiniert wird. Diese wirken als Elektroden und sind außerdem mit Katalysatoren beschichtet. Wird das komplexe Materialsystem in Wasser getaucht und beleuchtet, kann es Wassermoleküle zerlegen. Dabei entstehen Wasserstoff, der die Sonnenenergie in chemischer Form speichert, und Sauerstoff. Nach dem gegenwärtigen Stand der Technik gibt es noch mehrere Probleme: Zum einen muss trotz der zusätzlichen Materialschichten ausreichend Licht in die Solarzelle gelangen, um die Spannung für die Wasserspaltung zu erzeugen. Zum anderen halten die Halbleitermaterialien, aus denen Solarzellen in der Regel bestehen, dem mit Säure versetzten Wasser nicht lange stand. Daher braucht das „Künstliche Blatt“ eine stabile Schutzschicht, die gleichzeitig transparent und leitfähig sein muss.

Das HZB-Team arbeitete mit Proben aus Silizium, einem n-dotierten Halbleitermaterial, das als einfache Solarzelle bei Beleuchtung eine Spannung liefert. Die Materialwissenschaftlerin Anahita Azarpira, Doktorandin in der Gruppe von Dr. Thomas Schedel-Niedrig, präparierte diese Proben so, dass sich zunächst Ketten von Kohlenstoff-Wasserstoff-Verbindungen auf der Siliziumoberfläche bildeten. „In einem weiteren Schritt habe ich dann Nanopartikel aus dem Katalysator Rutheniumdioxid abgeschieden“, erklärt Azarpira. Als Ergebnis bildete sich eine leitfähige und stabile Polymerstruktur von nur drei bis vier Nanometern Dicke. Dabei waren die Reaktionen in der elektrochemischen Präparationszelle überaus kompliziert.

Mit dem neuen Verfahren werden die Rutheniumdioxid-Partikel zum ersten Mal doppelt genutzt: Zuerst sorgen sie dafür, dass eine effektive organische Schutzschicht entsteht. So werden die sonst sehr komplizierten Verfahren zur Herstellung von Schutzschichten wesentlich vereinfacht. Erst dann erledigen sie ihren „normalen Job“ und beschleunigen die Aufspaltung von Wasser in Sauerstoff und Wasserstoff.

### Ausgezeichnete Stabilität und hohe Stromdichte

Die in dieser Weise geschützte Silizium-Elektrode erreicht Stromdichten von mehr als 15 mA/cm<sup>2</sup>. Dies belegt, dass die Schutzschicht eine hohe Leitfähigkeit aufweist, was für eine organische Schicht keineswegs selbstverständlich ist. Während der gesamten Messdauer von 24 Stunden beobachteten die Forscher außerdem keine Degradation der Zelle, die Ausbeute blieb stabil. Bemerkenswert ist, dass zunächst ein ganz anderes Material als organische Schutzschicht favorisiert wurde: Graphen. Dieses viel diskutierte zweidimensionale Material konnte jedoch bisher nur eingeschränkt für elektrochemische Prozesse eingesetzt werden, während die am HZB entwickelte Schutzschicht sehr gut funktioniert. „Weil sich das neuartige Material sowie das Abscheidungsverfahren auch für andere Anwendungen eignen könnten, streben wir nun internationale Schutzrechte an“, sagt Teamleiter Schedel-Niedrig. arö

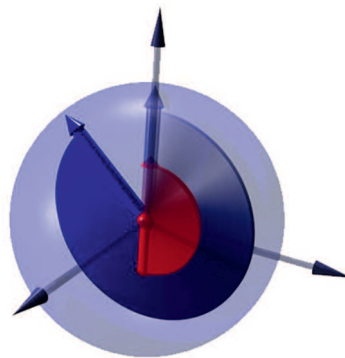
Advanced Energy Materials, Vol. 6, Issue 10, 1502314 (DOI: 10.1002/aenm.201502314): Sustained Water Oxidation by Direct Electrosynthesis of Ultrathin Organic Protection Films on Silicon; A. Azarpira et. al.

## MEHR ENERGIE AUS DER SONNE DURCH SPINS

Ein internationales Team aus Berlin und Cambridge hat in organischen Halbleitern untersucht, wie sich durch Lichtabsorption erzeugte sogenannte **Singulett-Anregungszustände** aufspalten. Der Effekt kann bei der Optimierung von Solarzellen und in spintronischen Bauelementen genutzt werden.

Licht kann in bestimmten Halbleitermaterialien Atome oder Moleküle anregen und damit elektrische Ströme erzeugen. Nach diesem Prinzip funktionieren Solarzellen. In vielen Materialien erzeugt ein Lichtteilchen (Photon) einen Anregungszustand, ein sogenanntes Singulett-Exziton. In manchen Materialien kann sich dieses spontan in zwei neue Exzitonen aufspalten, die jeweils einen anderen Spin besitzen (Triplett-Zustand). Diese angeregten Triplett-Exzitonen wandern durch das Material und erzeugen im Idealfall wieder jeweils ein bewegliches Elektron und somit doppelt so viel elektrischen Strom wie ohne Singulett-Aufspaltung. Daher ist es hochinteressant, Materialien in Solarzellen zu integrieren, in denen Singulett-Aufspaltung auftritt. Die technische Umsetzung des Konzepts ist jedoch schwierig, denn die Triplett-Exzitonen-Paare zeichnen sich häufig durch eine extrem kurze Lebensdauer aus, die auch vom Spin-Zustand abhängt. Es ist daher aufschlussreich, die Spin-Zustände von der Erzeugung des Triplett-Paars bis zum Zerfall experimentell zu beobachten.

Nun hat ein Team um Prof. Dr. Jan Behrends, Juniorprofessor an der Freien Universität Berlin und am HZB, in Zusammenarbeit mit der University of Cambridge den Spin-Zustand in einem organischen Halbleiter im Zeitverlauf gemessen. Die Experimente fanden am Berliner Joint EPR Lab statt, das HZB und FU Berlin gemeinsam betreiben. Dort ist es möglich, die Elektro-



Anregungszustände des Elektronenspins könnten künftig dazu beitragen, Solarzellen noch effizienter zu machen.

nen-Paramagnetische-Resonanz-Spektroskopie mit anderen Messverfahren zu kombinieren. Die Forscher beobachteten in ihren Experimenten sowohl schwach als auch stark gekoppelte Spin-Zustände, was auf eine Koexistenz von unterschiedlichen Paaren hinweist. Außerdem konnten sie stark gekoppelte Zustände noch einige Mikrosekunden nach deren Erzeugung messen. Bisher waren sie davon ausgegangen, dass die Lebensdauer dieser Zustände viel kürzer ist. Um die Effizienz von Solarzellen zu erhöhen, kommt es darauf an, die stark gekoppelten Spin-Zustände aufzuspalten. Auch über die Photovoltaik hinaus eröffnet diese Arbeit neue Möglichkeiten. So können die Ergebnisse hilfreich sein, um schnelle und energieeffiziente elektronische Bauelemente zu entwickeln, die solche Spin-Eigenschaften ausnutzen (Spintronik). arö

Nature Physics 13, 176–181 (DOI: 10.1038/nphys3908): Strongly exchange-coupled triplet pairs in an organic semiconductor; L. R. Weiss et. al.

### DIE HERSTELLUNG VON CIGS-SOLARZELLEN BESCHLEUNIGEN

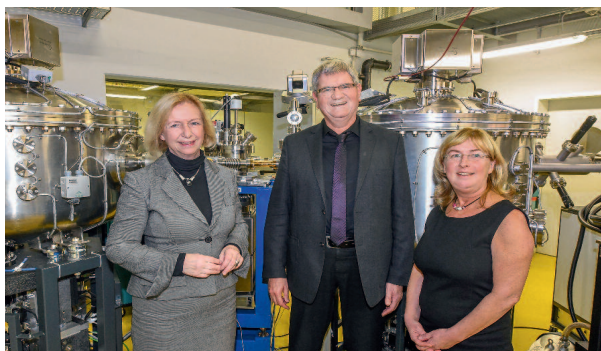
Ein Projektkonsortium aus Forschung und Industrie hat unter Beteiligung des Kompetenz-Zentrums Dünnschicht- und Nanotechnologie für Photovoltaik Berlin (PVcomB) ein großes Drittmittelprojekt eingeworben. Im speedCIGS-Projekt soll am PVcomB ein sogenannter Ko-Verdampfungsprozess optimiert werden, um die aus Kupfer, Indium, Gallium und Selen bestehenden CIGS-Schichten für Dünnschichtsolarzellen herzustellen. Der am PVcomB angewandte Herstellungsprozess wird bereits in der Industrie genutzt, läuft aber noch zu langsam ab. Mit speedCIGS soll dieser Prozess beschleunigt werden, damit bei gleichen Investitionskosten mehr Module pro Zeiteinheit produziert werden können. Das Projekt wird vom Bundeswirtschaftsministerium mit 4,7 Millionen Euro über vier Jahre gefördert, davon gehen 1,7 Millionen Euro an das HZB. sz//il

## EMIL STARTKLAR FÜR „POWER-TO-X“

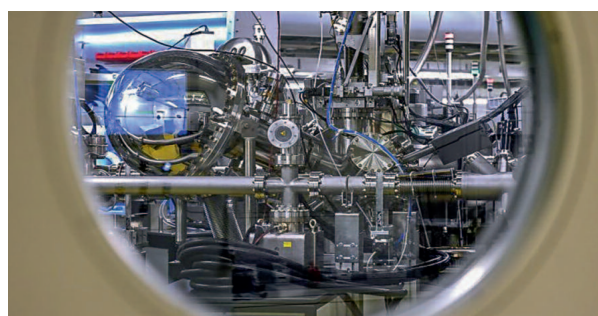
Das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) hat das **Kopernikus-Projekt „Power-to-X“ (P2X)** aufgesetzt, um Forschungsprojekte zur Umwandlung von elektrischer Energie aus Sonne und Wind in chemische Grundstoffe, gasförmige Energieträger und Kraftstoffe voranzubringen. An dem Forschungsvorhaben beteiligt sich auch das HZB mit seinem neuen Laborkomplex EMIL.

Mit seinen „Kopernikus-Projekten für die Energiewende“ will das BMBF technologische und wirtschaftliche Lösungen für den Umbau des Energiesystems fördern. Die aus Sonne oder Wind erzeugte Strommenge hängt beispielsweise stark vom Wetter sowie der Tages- und Jahreszeit ab. Daher ist eine der wichtigsten Bedingungen für eine erfolgreiche Energiewende, effiziente Speicherlösungen zu entwickeln. Eine Förderlinie des Kopernikus-Programms ist „Power-to-X“ (P2X). Damit sollen Technologien vorangetrieben werden, die den Überschussstrom aus Sonne oder Wind elektrochemisch in gasförmige Energieträger wie Wasserstoff oder chemische Grundstoffe umwandeln. Im Anschluss können diese gespeichert oder zu Treibstoffen und Chemieprodukten weiterverarbeitet werden. Das Projekt P2X soll innerhalb von zehn Jahren neue technologische Entwicklungen zur industriellen Reife bringen.

Das HZB stellt mit dem Energy Materials In-Situ Laboratory Berlin (EMIL) einmalige Synthese- und Charakterisierungsmöglichkeiten mit direktem Zugang zum Röntgenlicht der Synchrotronquelle BESSY II zur Verfügung. Die Arbeitsgruppen von Prof. Bernd Rech und Prof. Marcus Bär sind an dem Projekt beteiligt: „Wir werden die vielseitigen und komplementären Analysemöglichkeiten im EMIL-Labor nutzen, um die chemischen und elektronischen Eigenschaften der von



Bundesforschungsministerin Prof. Johanna Wanka (li.) mit den Projektleitern Prof. Robert Schlögl (MPG) und Prof. Simone Raoux (HZB) anlässlich der offiziellen Einweihung des Laborkomplexes EMIL am 31. Oktober 2016.



Das neue Energy Materials in situ Laboratory (EMIL) mit direktem Zugang zum Röntgenlicht von BESSY II wurde am 31. Oktober 2016 eröffnet.

den Projektpartnern entwickelten Katalysatoren zu untersuchen“, erläutert Marcus Bär, der die P2X-Aktivitäten am HZB koordiniert.

Ein wesentliches Augenmerk wird darauf liegen, wie sich die Katalysatormaterialien in Elektrolyten unter realen Arbeitsbedingungen ändern. Dies ist entscheidend, da die katalytisch aktive Substanz oft erst im Betrieb generiert wird. Ihre Stabilität bestimmt dann auch die Alterung und damit die Lebensdauer des Elektrolyseurs. „Wir werden im Rahmen des Kopernikus-Projekts die experimentellen Anlagen des EMIL-Labors erweitern, um solche *in operando*-Untersuchungen unter echten atmosphärischen Bedingungen zu ermöglichen“, führt Bär aus.

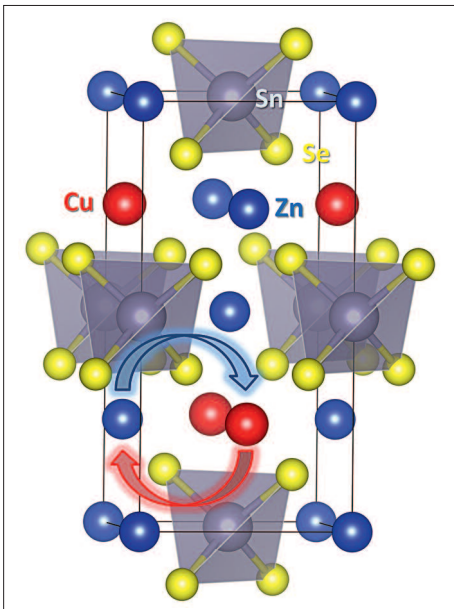
Insgesamt sind 17 Forschungseinrichtungen, 26 Industrieunternehmen sowie drei zivilgesellschaftliche Organisationen eingebunden. In der ersten Entwicklungsphase fördert das BMBF das Projekt mit 30 Millionen Euro. Zusätzlich zur Förderung durch das BMBF bringen die Industriepartner Forschungsleistungen im Umfang von weiteren 8,3 Millionen Euro ein. Mit P2X wird ein Forschungsverbund aufgebaut, der bestehende Großprojekte und vorhandene Infrastrukturen mit einbezieht und Schnittstellen zur Industrie ausbaut. Das Projekt wird von der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen, dem Forschungszentrum Jülich und der Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V. (DECHEMA) gemeinsam koordiniert. *red*

## ATOMARES PLATZRÜCKEN

Forschenden am HZB ist es gelungen, einen markanten Phasenübergang in einem **Kesterit-Material** nachzuweisen, bei dem sich die innere Struktur der Substanz bei einer bestimmten Temperatur plötzlich ändert –, und die Ursache dafür zu erklären. Das hilft bei der Entwicklung neuartiger Solarzellen.

Die Menge an Energie, die mit dem Sonnenlicht auf die Erde gelangt, ist gigantisch: Sie übertrifft jedes Jahr den weltweiten Bedarf der Menschheit etwa um das 10.000-Fache. Kein Wunder, dass viele Experten die Zukunft der Energieversorgung in der Nutzung des unerschöpflichen solaren Angebots sehen. Die Stromerzeugung aus dem Sonnenlicht erfolgt bislang meist mit Solarzellen auf der Basis von Silizium. Sie lassen sich einfach und zuverlässig mit etablierten Verfahren aus der Chipindustrie herstellen und haben einen recht hohen Wirkungsgrad bei der Umwandlung von solarer in elektrische Energie. Doch der Rohstoff für Siliziumzellen könnte knapp werden.

Die Anordnung der Kupfer- (rot) und Zink-Ionen (blau) innerhalb der Kristallstruktur von Kesterit ist temperaturabhängig. Platzwechsel bei erhöhter Temperatur (blauer und roter Pfeil) haben Auswirkungen auf die elektrischen und optischen Eigenschaften des Materials.



Solarzellen der zweiten Generation, sogenannte Dünnschicht-solarzellen, basieren auf anderen chemischen Elementen – etwa Indium, Gallium, Cadmium, Arsen oder Selen. Einige davon sind bereits heute rar. Daher suchen die Forscher seit Jahren nach alternativen Materialien für die Fertigung von Solarzellen. „Die sogenannten Kesterite sind als Absorbermaterial in Dünnschicht-solarzellen sehr erfolgversprechend“,

sagt Prof. Dr. Susan Schorr, Leiterin der Abteilung Struktur und Dynamik von Energiematerialien am HZB: Diese Klasse von Materialien ist nach dem Mineral Kesterit benannt: einem Sulfid, das unter anderem in Zinn-Lagerstätten vorkommt. Es enthält neben Schwefel noch Kupfer, Zink und Zinn – Elemente die häufig vorkommen und ungiftig sind. Für technische Anwendungen, bei denen eine hohe Reinheit erforderlich ist, wird das Material künstlich hergestellt. Man spricht dann auch von CZTS- oder CZTSe-Verbindungen. Das Kürzel steht für die Anfangsbuchstaben der englischen Namen der chemischen Elemente Kupfer, Zink, Zinn und Schwefel oder Selen. Susan Schorr forscht seit etlichen Jahren an solchen Verbindungen. Die Wissenschaftlerin sieht mehrere Vorteile als Material für die Photovoltaik: „Die in Kesteriten enthaltenen chemischen Elemente sind in großer Menge verfügbar – und sie enthalten keine giftigen Substanzen.“ Eine Einschränkung gibt es jedoch: Damit daraus gefertigte Solarzellen mit herkömmlichen Zellen aus Silizium konkurrieren können, muss zunächst ihre Effizienz deutlich verbessert werden.

### Besseres Verständnis der Struktur gewonnen

„Dazu ist es notwendig, die kristalline Struktur und die Materialeigenschaften möglichst genau zu verstehen“, betont Dr. Daniel Többens, der im Team von Susan Schorr forscht. Die Berliner Wissenschaftler wollen dem nachgehen. Dazu haben sie sich unter anderem einen Effekt vorgeknöpft, der erst seit wenigen Jahren bekannt ist: Die Anordnung der Atome in Kesterit-Kristallen verändert sich offenbar unterhalb einer Temperatur von etwa 200 Grad Celsius – ein auffälliger Wandel, der sich auch auf die elektrischen und optischen Eigenschaften des Materials auswirkt. „Es wurde schon vermutet, dass dieser Effekt auf Kupfer- und Zink-Ionen in der Kristallstruktur zurückzuführen ist, die beim Abkühlen des Materials ihre Anordnung verändern“, sagt Többens. Dem Team ist es nun gelungen, diesen Übergang direkt zu beobachten und zu belegen, in welcher Weise sich die Verteilung der Defekte verändert. Die Übergangstemperatur des am HZB untersuchten Materials CZTSe liegt bei ungefähr 200 Grad Celsius – und damit

weit unterhalb des bis 400 Grad Celsius reichenden Temperaturbereichs, bei dem Kesterit-Dünnschichten für die Anwendung in der Photovoltaik normalerweise hergestellt werden. „Deshalb ist die Änderung der Eigenschaften auch lange Zeit nicht aufgefallen“, berichtet Többens. „Man hat diese Phase des Abkühlens einfach für unwichtig gehalten und nicht beobachtet.“

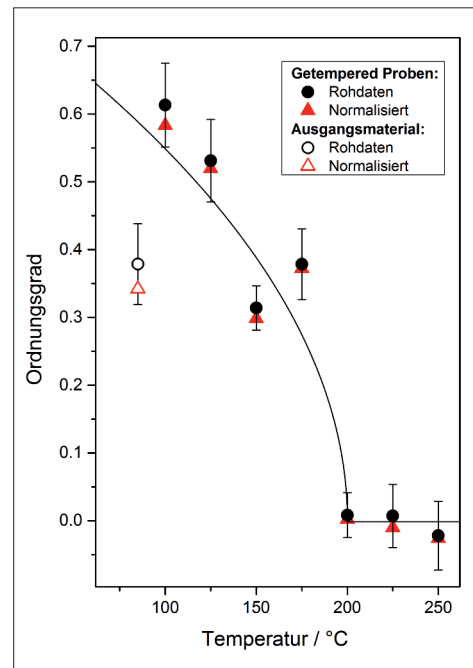
### Anomale Röntgenbeugung als Königsweg

Die Defekte, die er und seine Kollegen für die Veränderungen verantwortlich machen, sind Stellen in der Kristallstruktur, an denen Kupfer- und Zinkatome ihren Platz getauscht haben. Dass bei Raumtemperatur in Kesteriten eine Kupfer-Zink-Unordnung vorliegt, hatte Susan Schorr schon vor einigen Jahren mittels Neutronenbeugung entdeckt. Es ist schon lange bekannt, dass solche Defekte die Merkmale des Materials stark beeinflussen. „Es entstehen sogenannte Defektniveaus in der Bandlücke des Halbleitermaterials“, erklärt Többens. „Dadurch können Ladungsträger eingefangen werden, die dann nicht mehr zum elektrischen Strom beitragen.“

Allerdings: Um die genaue Verteilung von Kupfer- und Zink-Atomen zu bestimmen und die Veränderung bei unterschiedlichen Temperaturen zu verfolgen, mussten die Forscher einen experimentellen Trick anwenden. Denn die beiden üblichen Analyseverfahren – Neutronenbeugung und herkömmliche Röntgenbeugung – kamen dafür nicht infrage. „Für aussagekräftige Neutronenbeugungsexperimente benötigt man große Probenmengen, die sich kaum perfekt reproduzierbar herstellen lassen“, erklärt Daniel Többens. „Eine konventionelle Röntgenstrukturanalyse ist dagegen ungeeignet, weil Kupfer- und Zink-Atome im Kristall damit nicht zu unterscheiden sind.“ Denn die Zahl der Elektronen ist bei diesen beiden chemischen Elementen sehr ähnlich. Die Lösung fanden die Forscher in der anomalen Röntgenbeugung: Streuexperimenten mit Röntgenlicht einer Energie direkt an den Absorptionskanten der beiden Elemente. Denn bei diesen charakteristischen Energien lassen sich Kupfer und Zink deutlich voneinander unterscheiden. Die Photonquelle BESSY II am HZB lieferte dafür passgenau die benötigten Wellenlängen.

### Mustergültiger struktureller Phasenübergang

Doch ein Schritt fehlte noch: Um die Messdaten der anomalen Röntgenbeugung interpretieren zu können, mussten die Wissenschaftler eigens ein neues Auswertungsverfahren entwickeln. Die Mühe lohnte sich. Denn die Resultate, die sie damit erzielten, enthüllten zum ersten Mal unmittelbar, was bei dem ominösen Wechsel der Eigenschaften im Kristall geschieht: Die Verteilung von Kupfer und Zink in der Kristallstruktur geht beim Abkühlen unter 203 Grad Celsius von einem ungeordneten in einen geordneten Zustand über – ein Musterbeispiel für einen strukturellen Phasenübergang. Weil das bei so niedrigen Temperaturen



Der Ordnungsgrad des untersuchten Kesterits nimmt mit zunehmender Temperatur ab. Bei etwa 200 Grad Celsius erreicht er den Ordnungsgrad 0. Das entspricht vollständiger Unordnung – Kupfer und Zink sind in der Cu-Zn-Schicht zufällig verteilt. Eine vollständige Ordnung wäre ein Ordnungsgrad von 1.

geschieht, können Kristalle mit hoher Ordnung und wenig Defekten nur durch sehr langsames Abkühlen hergestellt werden.

„Diese Erkenntnis hat große Bedeutung für die Weiterentwicklung der Materialien“, sagt Többens. „Wir müssen nun herausfinden, wie wir die Kupfer-Zink-Unordnung vermeiden können, zum Beispiel durch gezielte Substitution mit anderen Elementen“, meint Abteilungsleiterin Susan Schorr. „So können wir die Kesterite für photovoltaische Anwendungen optimieren.“

rb

Phys. Status Solidi B 253, No. 10, 1890–1897, 2016 (DOI: 10.1002/pssb.201600372): Temperature dependency of Cu/Zn ordering in CZTSe kesterites determined by anomalous diffraction; D. M. Többens, G. Gurieva, S. Levchenko, T. Unold, and S. Schorr

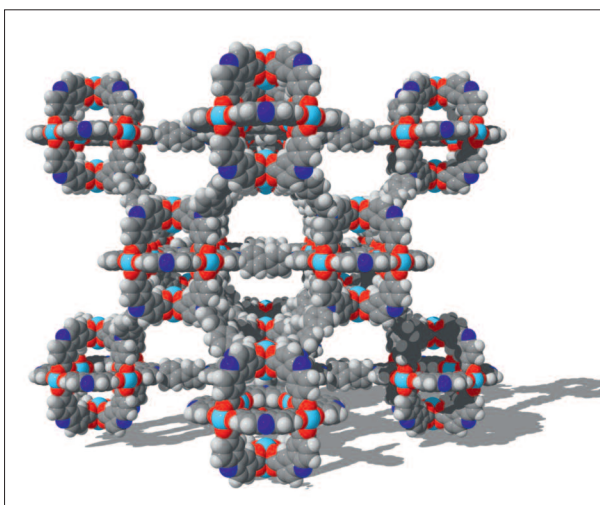
### KURZ ZUSAMMENGEFASST

- Einige Rohstoffe für Solarzellen wie Indium, Gallium, Cadmium, Arsen oder Selen sind heute bereits rar. Ein Team um Prof. Dr. Susan Schorr forscht daher an Kesteriten als alternativem Absorbermaterial.
- Kesterite weisen bei höheren Temperaturen Defekte in ihrer Kristallstruktur auf. Diese Defekte verändern die elektrischen und optischen Eigenschaften der Kesterite ganz erheblich.
- Dem Team ist es gelungen, die Veränderung dieser Defekte im Kristall zu beobachten. Im nächsten Schritt geht es um die gezielte Steuerung dieser Vorgänge, um Kesterite für photovoltaische Anwendungen zu optimieren.

## ENERGIESPEICHERMATERIALIEN UNTER DRUCK

Metallorganische Gerüststrukturen (MOFs) können in ihren Poren Gase wie Methan speichern. Nun haben Teams der TU Dresden und des HZB diesen Prozess an BESSY II erstmals genau beobachtet und einen überraschenden Effekt entdeckt: Ab einem bestimmten Druck entweicht **adsorbiertes Gas eruptionsartig**, weil Poren schrumpfen. Das stellt neue Anwendungen von MOFs in Aussicht.

**M**ethan gilt als umweltfreundliche Alternative zu Benzin und Diesel, vor allem, wenn es künftig auch mit Sonnenenergie erzeugt werden kann. Doch um Fahrzeuge mit Methan zu betanken, müssen geeignete Materialien entwickelt werden, die das Gas sicher speichern. Als Kandidaten dafür gelten sogenannte MOFs, metallorganische Gerüststrukturen, in deren Poren sich Gase einlagern lassen. Nun hat ein Team der Technischen Universität Dresden ein MOF mit dem Namen DUT-49 entwickelt. Die Struktur von DUT-49 enthält relativ große Hohlräume mit Durch-



Die dreidimensionale Netzwerkstruktur des ultraporösen und flexiblen Materials DUT-49 besitzt eine hohe Speicherkapazität für Methangas.

messern von 1,0 bis 2,4 Nanometern und kann so extrem viel Methan aufnehmen – bei circa 20 Grad Celsius sind es mehr als 300 Gramm Methan pro Kilogramm DUT-49. Daher wird DUT-49 als Methanspeicher für den Einsatz in mit Erd- oder Biogas betriebenen Autos in Betracht gezogen.

Um dieses Material weiter zu optimieren, hat nun das Dresdner Team um Prof. Dr. Stefan Kaskel die Druck- und Temperaturabhängigkeit der Gasaufnahme und -abgabe und die damit verbundenen Veränderungen analysiert. In Zusammenarbeit mit HZB-Experten um Dr. Dirk Wallacher und Dr.

Daniel Töbrens haben sie eigens eine Probenumgebung entwickelt, die es ermöglicht, während der Röntgenuntersuchungen sowohl Temperatur und Gasdruck einzustellen, als auch die Menge des aufgenommenen Gases zu bestimmen.

Mit Röntgenbeugung und Röntgenabsorptionsspektroskopie (EXAFS) an der KMC-2-Beamline von BESSY II konnten die Forscher die Kristallstruktur des Materials aufklären und zeigen, wo in den Poren des Kristalls die Gasmoleküle eingelagert werden und wie sich das Gerüst dabei verformt. Die hierbei verwendete Probenumgebung ermöglicht das kontrollierte Beladen der Proben mit verschiedenen Gasen während des Messens (in situ) und wurde im Rahmen eines vom BMBF geförderten Vorhabens realisiert. Dabei handelte es sich um ein Gemeinschaftsprojekt der TU Dresden, der HZB-Probenumgebungsgruppe und der HZB-Abteilung Struktur und Dynamik von Energiematerialien.

### Eruption von Gas aus den schrumpfenden Poren

Bei den Untersuchungen stellte sich heraus, dass sich DUT-49 ungewöhnlicher verhält als erwartet: Wenn der Druck des von außen zugeführten Methan- oder Butangases allmählich erhöht wird, dann werden zunächst mehr und mehr Gasmoleküle in die Struktur aufgenommen und füllen die kleinen Poren. Überschreitet der Gasdruck aber einen Grenzwert von zehn Kilopascal für Methan oder 30 Kilopascal für Butan, dann klappt die Struktur förmlich in sich zusammen. Die das Gerüst aufspannenden organischen Moleküle werden verdreht und geknickt, wodurch sich die Poren der Struktur schließen. Dabei wird eruptionsartig Gas aus dem Material ausgestoßen. Die Kristallstruktur schrumpft auf weniger als die Hälfte ihres Volumens. Das Porenvolumen verringert sich sogar um 61 Prozent. Erst bei noch höheren Drücken öffnet sich die Struktur allmählich wieder und Poren aller Größen werden vollständig mit Gasmolekülen gefüllt. Wird der Druck dann wieder verringert, dann geschieht das Umgekehrte und die offenporige Struktur bildet sich wieder. Allerdings erfolgt dies erst bei sehr viel niedrigerem Druck – ein Effekt, den man als Hysterese bezeichnet.

Quantenmechanische Berechnungen von zwei Teams aus Paris und Montpellier zeigen, dass die veränderte Form der

kleinen Poren in der geschlossenen Form für die Einlagerung von Methanmolekülen besonders günstig ist. Bei sehr hohem Gasdruck ist es dagegen energetisch günstiger, wenn viel Methan auch in den großen Poren eingelagert wird. Bei niedrigem Druck ist nicht genug Methan vorhanden, um die Poren zu schließen.

Oberhalb eines Druck-Schwellenwerts schrumpfen die Poren so rasch, dass das MOF bereits adsorbiertes Gas ausstößt, und zwar eruptionsartig, sodass der Gasdruck noch weiter steigt. Nach dem Zusammenklappen enthält die Struktur also weniger Gas als vorher, obwohl der Gasdruck höher ist.

Eine solche „negative Gasadsorption“ ist sehr selten; bei metallorganischen Gerüststrukturen wurde sie vorher noch nie beobachtet. Hierdurch eröffnen sich neue potenzielle Anwendungen, etwa für das Design von mikropneumatischen Elementen für Rettungssysteme, Mikrotechnik und Trennverfahren, die auf Veränderungen des Umgebungsdruckes empfindlich reagieren. *arö*

Nature 532, 348–352 (DOI: 10.1038/nature17430): A pressure-amplifying framework material with negative gas adsorption transitions; S. Krause et. al.

## ENERGIE SPEICHERN MIT SILIZIUM-DÜNNSCHICHTEN

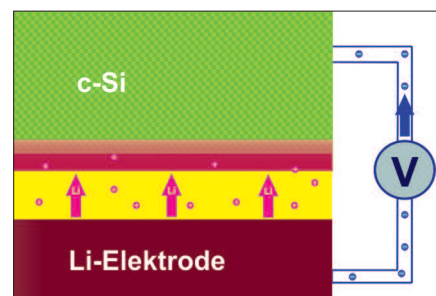
Die Kapazität von Lithium-Ionen-Akkus könnte theoretisch sechsfach werden, wenn ihre Anode aus Silizium bestünde. Ein HZB-Team hat erstmals mit Neutronenmessungen beobachtet, wie **Lithium-Ionen in Silizium** einwandern. Ihre Arbeit gibt wichtige Hinweise für das Design von Silizium-Lithium-Akkus.

**L**ithium-Ionen-Akkus versorgen mobile Geräte zuverlässig mit Energie. Elektroautos kommen dagegen mit den gängigen Lithium-Ionen-Akkus noch nicht sehr weit.

Das liegt an den zurzeit verwendeten Elektroden aus Graphitschichten, die nur eine begrenzte Anzahl von Lithium-Ionen einlagern können, sodass sich die Kapazität der Akkus kaum weiter steigern lässt. Daher sind Halbleitermaterialien wie Silizium im Gespräch, denn es ist in der Lage, enorme Mengen an Lithium aufzunehmen. Allerdings zerstört das Einwandern der Lithium-Ionen die Kristallstruktur des Siliziums.

Dabei kann das Volumen auf das Dreifache anschwellen, was zu großen mechanischen Spannungen führt.

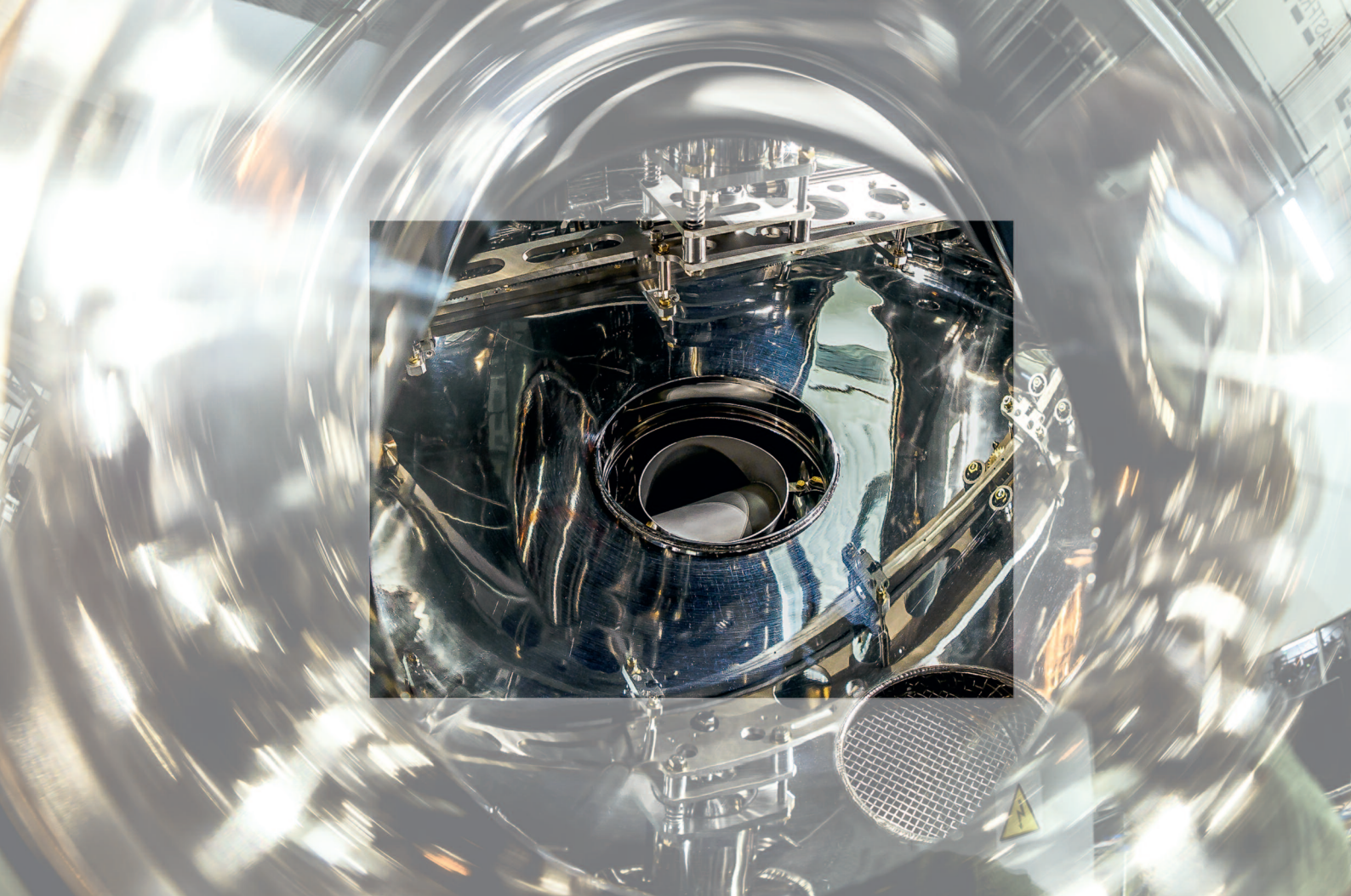
Nun hat ein Team aus dem HZB-Institut für Weiche Materie und Funktionale Materialien unter Leitung von Prof. Dr. Matthias Ballauff erstmals eine Halbzelle aus Lithium und Silizium beim Be- und Entladen direkt beobachtet. „Mit der Neutronenreflektometrie konnten wir präzise verfolgen, wo sich Lithium-Ionen in der Silizium-Elektrode einlagern und auch, wie schnell sie sich bewegen“, sagt Dr. Beatrix-Kamelia Seidlhofer, die die Experimente an der Neutronenquelle BER II durchgeführt hat. Dabei fand sie zwei unterschiedliche Zonen. Nahe der Grenzfläche zum Elektrolyten bildet sich eine etwa 20 Nanometer dünne Schicht mit extrem hohem Lithium-Gehalt: Auf zehn Silizium-Atome kommen 25 Lithium-Atome. Daran schließt sich eine zweite, lithiumärmere Schicht an. Hier kommt auf zehn Silizium-Atome nur noch ein



Lithium-Ionen wandern durch den Elektrolyten (gelb) in die Schicht aus kristallinem Silizium (c-Si) ein. Im Laufe der Beladung bildet sich eine 20 Nanometer dünne Schicht (rot) in der Silizium-Elektrode, die extrem viele Lithium-Atome aufnimmt.

Lithium-Atom. Beide Schichten zusammen sind nach dem zweiten Ladezyklus weniger als 100 Nanometer dick. Nach dem Entladen bleibt in der Silizium-Grenzschicht zum Elektrolyten etwa ein Lithium-Ion pro Silizium-Platz in der Elektrode zurück. So errechnet Beatrix-Kamelia Seidlhofer, dass die theoretische maximale Kapazität solcher Silizium-Lithium-Batterien bei etwa 2300 Milliamperestunden pro Gramm liegt. Das ist mehr als das Sechsfache der Kapazität eines Lithium-Ionen-Akkus, der mit Graphit arbeitet (372 mAh/g). Demnach müssten sehr dünne Siliziumfilme völlig ausreichen, um maximal viel Lithium aufzunehmen, was viel Material und Energie bei der Herstellung sparen würde. *arö*

ACS Nano, 2016, 10 (8), pp 7458–7466 (DOI: 10.1021/acsnano.6b02032): Lithiation of Crystalline Silicon as Analyzed by Operando Neutron Reflectivity; B.-K. Seidlhofer et. al.



## METHODENENTWICKLUNG FÜR DIE FORSCHUNG MIT WEICHER RÖNTGENSTRAHLUNG

**Die Nanocluster Trap bei BESSY II:** Nanoteilchen aus einigen wenigen bis hin zu vielen Hunderten Atomen sind das Bindeglied zwischen einzelnen Atomen und ausgedehnten Festkörpern. Ihre Eigenschaften unterscheiden sich teilweise erheblich von denen der Materie, die wir in unserer makroskopischen Alltagswelt kennen. Das intensive Röntgenlicht der Photonenquelle BESSY II am HZB erlaubt Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern, den Magnetismus der Nanoteilchen genauer zu erforschen – doch dafür müssen sie die winzigen Teilchen zunächst in die richtige Position bringen.

In einem Verbundprojekt des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) haben Forschende der Universität Freiburg in enger Kooperation mit dem HZB deshalb eine spezielle Ionenfalle für die winzigen Teilchen entwickelt. Die sogenannte Nanocluster Trap, die einen festen Messplatz an BESSY II erhalten hat, hält Nanoteilchen gefangen, sodass sie gekühlt, magnetisiert und mit Röntgenlicht bestrahlt werden können. Der Messplatz steht nun Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern aus aller Welt zur Verfügung.



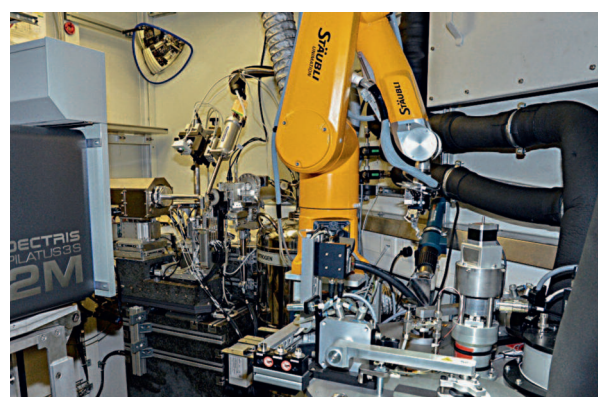
## SCHNELLE SUCHE NACH NEUEN WIRKSTOFFEN

Die MX-Beamlines der Röntgenquelle BESSY II am HZB sind auf die hochautomatisierte **Strukturanalyse von Proteinkristallen** spezialisiert. Teams der Philipps-Universität Marburg und des HZB haben die zuverlässige Auswertung der Datensätze automatisiert und erfolgreich getestet.

Die Suche nach neuen Wirkstoffen gegen ein Krankheitsbild gleicht im ersten Schritt dem Aufknacken eines Hochsicherheitsschlusses: Der Wirkstoff muss wie ein Schlüssel in das Zielmolekül hineinpassen. Das Zielmolekül ist dabei ein Protein (Eiweißmolekül), das im Organismus eine bestimmte Funktion erfüllt. Mit dem passenden Wirkstoff lässt sich beeinflussen, ob und wie gut es diese Funktion ausüben kann. So lässt sich im Krankheitsfall mit dem geeigneten Wirkstoff eine aus den Fugen geratene Funktion korrigieren. Allerdings muss man den richtigen Wirkstoff zunächst identifizieren. Und diese Suche kann sehr langwierig sein: Bildlich gesprochen gibt es unendlich viele Schlüssel, und es kostet Zeit, sie alle auszuprobieren. Ein effizienter Panzerknacker sucht daher nicht lange in einem Berg von Schlüsseln herum, sondern tastet Zacken um Zacken des Schlosses ab, bis er die richtige Arretierung einstellen kann.

Ein ähnliches Verfahren hat sich mit dem Fragmentscreening auch in der Strukturbiologie etabliert: Um rascher den passenden „Schlüsselrohling“ zu finden, setzt man ihn aus einzelnen „Fragmenten“ zusammen. Dafür testet man Hunderte von sehr kleinen Molekülen (Fragmente) darauf, ob sie an das Zielprotein andocken. Aus den passenden Fragmenten wird dann die „Leitstruktur“ für den Wirkstoff zusammengesetzt. An den MX-Beamlines von BESSY II läuft dieses Verfahren bereits seit drei Jahren hochautomatisiert und ermöglicht einen großen Durchsatz von Proben. Die MX-Beamlines sind in Deutschland mit bisher über 2000 bestimmten Proteinstrukturen mit Abstand am produktivsten, sie sind stark überbucht und die Nachfrage kommt dabei sowohl aus der Grundlagenforschung als auch von Nutzergruppen aus der Industrie.

Nun ist es im Rahmen eines Verbundforschungsprojekts zwischen der Philipps-Universität Marburg und dem HZB gelungen, diese Automatisierung noch einen Schritt weiterzuführen: „Mit dem Fragmentscreening können wir Hunderte von Proben durchmessen, sodass die Auswertung von Hand eigentlich nicht mehr sinnvoll machbar ist“, sagt Dr. Manfred Weiss, der am HZB das MX-Team leitet. Mit der Gruppe des Kooperationspartners Prof. Dr. Gerhard Klebe,



Jede der drei MX-Beamlines an der Photonenquelle BESSY II bietet spezifische Charakteristika zur Untersuchung von Proteinkristallen.

Uni Marburg, entwickelten beide Teams ein Computerprogramm. Damit können die Rohdaten einer Röntgenstrukturanalyse mit einer Kaskade von hintereinandergeschalteten Auswerterroutinen geprüft und diejenigen Fragmente identifiziert werden, die sich an das Protein binden. Die Gruppe um Klebe stellte dafür die Protein-Kristalle und eine ganze Bibliothek unterschiedlicher Fragmentmoleküle zur Verfügung. Insgesamt testeten die Kooperationspartner mit dem neu konzipierten Expertensystem 364 Kristalle aus einem bestimmten Protein, die mit unterschiedlichen Fragmentmolekülen getränkt waren. Dabei ist das Expertensystem auch in der Lage, die Strukturanalysen zu verfeinern: „Ohne die Verfeinerung fällt ein Teil der geeigneten Fragmente durchs Raster“, erklärt Weiss. „So hatten wir im ersten Durchgang nur etwa 50 Kandidaten identifiziert, die Verfeinerung hat dann weitere 32 Kandidaten aufgezeigt.“ Die Arbeit zeigt, dass das neue Expertensystem präzise Aussagen ermöglicht, welche Fragmente als Bestandteile der gesuchten Leitstruktur infrage kommen. Dadurch kann sich die Suche nach Wirkstoffen beschleunigen. *arö*

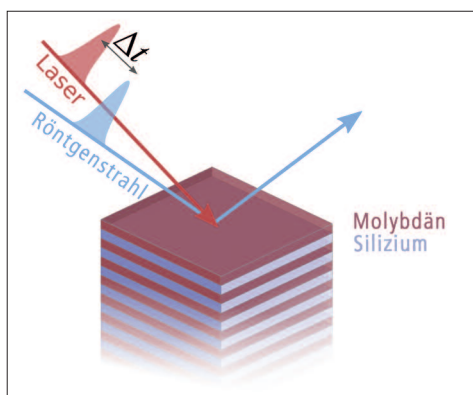
Structure, Vol. 24, Issue 8, pp 1398-1409 (DOI: 10.1016/j.str.2016.06.010): High-Throughput Crystallography: Reliable and Efficient Identification of Fragment Hits; J. Schiebel et.al.

## STANDARD-RÖNTGENSPIEGEL FÜR ULTRASCHNELLE EXPERIMENTE

Bei zeitaufgelösten, ultraschnellen Anregungs-Abfrage-Experimenten müssen Wissenschaftler den zeitlichen Überlapp zwischen den zwei ausgesendeten Lichtpulsen bestimmen, um zu schlüssigen Ergebnissen zu kommen. Ein Team des HZB und der Universität Potsdam hat eine neue und überraschend einfache Lösung gefunden, um diesen Überlapp nun auch bei Experimenten mit **Lichtpulsen unterschiedlicher Wellenlänge** exakt zu messen.

**E**lektronische, magnetische und strukturelle Prozesse in Energiematerialien finden auf Zeitskalen zwischen Femtosekunden und 100 Pikosekunden statt. Um sie zu beobachten, wird die Probe mit einem ersten Lichtpuls angeregt und dann mit einem zeitlich verzögerten Abfragepuls „abgetastet“. In jedem dieser zeitaufgelösten Anregungs-Abfrage-Experimente (Pump-Probe) ist die genaue Kenntnis vom zeitlichen und räumlichen Überlapp der Anrege- und Abfragepulse auf der Probe eine unverzichtbare Voraussetzung.

Die Röntgenreflektivität des Mo/Si-Multilagenspiegels wird durch den um  $\Delta t$  zeitversetzten Laserpuls stark verändert.



zung. Das Problem wurde in der Laser-Community bereits mithilfe von nichtlinearen Kristallen gelöst. Es war damit bisher aber nicht möglich, diesen Überlapp auch bei Lichtpulsen aus ganz unterschiedlichen Spektralbereichen sowie Röntgen- und sichtbarem Licht, zu bestimmen.

Das wichtigste Ziel für das Team war es, eine möglichst vielseitige und schnelle Kreuzkorrelationsmethode für ein breites Spektrum an Röntgen- und sichtbaren Photonen sowie für alle an BESSY II verfügbaren Zeitskalen von 100 Femto- bis 100 Pikosekunden zu finden. Sie wählten hierfür einen Molybdän-Silizium (Mo/Si)-Multilagen-Spiegel, der für den Weichröntgenbereich optimiert wurde. Der Spiegel besteht aus alternierenden Lagen von metallischem Molybdän und halbleitendem Silizium von jeweils nur wenigen Nanometern Dicke. Durch diese Multilagenstruktur entstehen sogenannte

Übergitter-Bragg-Peaks in der Röntgendiffraktion, welche von etwa 100 eV bis in den harten Röntgenbereich mit einer Reflektivität von bis zu 70 Prozent detektierbar sind.

Die Experimentatoren benutzen einen Laser mit 50 Femtosekunden kurzen Pulsen bei einer Wellenlänge von 800 Nanometern (nahes Infrarot), um selektiv nur die Molybdän-Lagen in dem Mo/Si Spiegel optisch anzuregen. Das ultraschnelle Heizen von nur jeder zweiten Lage führt zu einer quasi-instantanen Erzeugung von kohärenten akustischen Phononen, welche die Reflektivität des Spiegels gleich auf zwei unterschiedlichen Zeitskalen stark verändert. Das bietet eine einfache Möglichkeit, um den zeitlichen Überlapp zwischen Röntgen- und Laserpulsen über verschiedene Zeitskalen hinaus zu finden.

### Einfache Umsetzung und erfolgreicher Einsatz

Das Konzept funktioniert nicht nur für einen breiten Bereich von Photonenenergien, sondern lässt sich auch ohne Änderungen der Probenumgebungen implementieren, da die laser-induzierte Gitterdynamik unabhängig von äußeren Feldern oder Temperaturänderungen ist und somit sogar unter atmosphärischen Bedingungen gemessen werden kann. Desweiteren sind Mo/Si-Spiegel extrem widerstandsfähig gegenüber Laser- und Röntgeneinfluss oder Oxidation. Die Forscher können dank der Möglichkeit, die Spiegelparameter anzupassen sowie durch ihr klares Verständnis der ultraschnellen Gitterdynamik in Multilagenstrukturen das Konzept für spezielle Anwendungen weiter optimieren. Der Mo/Si-Kreuzkorrelator wurde bereits an der UE52/SGM in der Transmissions-NEXAFS-Kammer erfolgreich angewendet, um den zeitlichen Überlapp zwischen dem BESSY II-Hybridbunch und Laserpulsen des neuen MHz-Lasers präzise zu bestimmen. In Zukunft wird der BESSY VSR Modus Röntgenpulse mit einer Dauer von nur wenigen Pikosekunden ständig an allen Strahlrohren bereitstellen. arö

Struc. Dyn. 3, 054304, 2016 (DOI: 10.1063/1.4964296): Versatile soft X-ray-optical cross-correlator for ultrafast applications; D. Schick et. al.

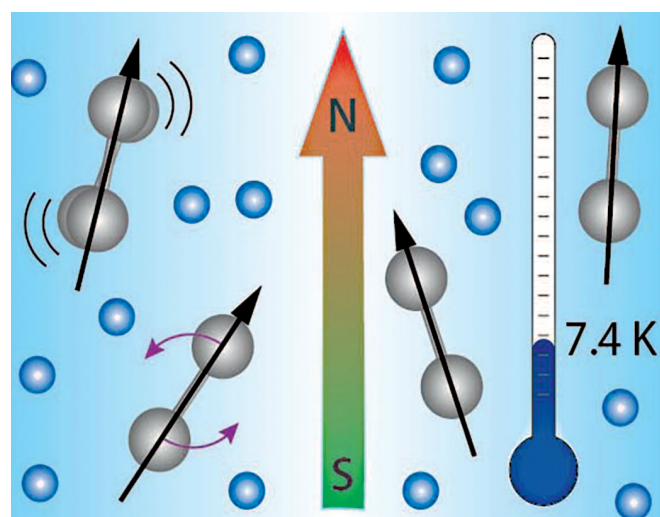
## NEUER REKORD BEIM AUFSTELLEN EINER IONEN-FALLE

Ein internationales Forscherteam hat einen neuen Temperaturrekord für sogenannte Quadrupol-Ionenfallen aufgestellt, in denen elektrisch geladene Molekül-Ionen gefangen sind. Mit ihnen können Magnetismus und Grundzustände von Molekül-Ionen untersucht werden, um neue Materialien für eine **energieeffiziente Informationstechnologie** zu entwickeln.

Den Wissenschaftlern aus Deutschland, Schweden und Japan gelang es, mit einem Puffergas etwa zehn Millionen Ionen auf 7,4 Kelvin (circa minus 265,8 Grad Celsius) abzukühlen. Das ist ein neuer Rekord. Zuvor war es nur möglich, etwa tausend Ionen mit Puffergas auf 7,5 Kelvin abzukühlen. Für spektroskopische Analysen reichen tausend Ionen jedoch bei Weitem nicht aus. „Bisher gingen alle davon aus, dass es nicht möglich sei, mit einer Quadrupol-Ionenfalle für so hohe Ionendichten noch tiefere Temperaturen zu erreichen. Aber es geht eben doch“, sagt HZB-Forscher Dr. Tobias Lau. Denn das elektromagnetische Wechselfeld fängt die gespeicherten Ionen nicht nur ein, sondern „schüttelt“ sie auch, sodass sie ständig Energie gewinnen und die Temperatur steigt. Um diese Energie wieder abzuführen, hat das Team Helium als Puffergas eingeführt, und zwar mit relativ hohem Druck. „Man muss sich dies als eine Art von kaltem Sirup vorstellen, der die Makro-Bewegungen der Teilchen dämpft und Rotation und Translation verlangsamt“, sagt Dr. Vicente Zamudio-Bayer von der Universität Freiburg. Die Experimente wurden an der UE52-PGM-Endstation an BESSY II durchgeführt, wo sich die Polarisation der weichen Röntgenstrahlung variabel einstellen lässt. Der Versuchsaufbau an dieser Beamline ist weltweit einzigartig, weil er die Untersuchung von Ionen bei tiefen Temperaturen mit Magnetfeldern und Röntgenspektroskopie ermöglicht. Dabei kann die Probe unter einem äußeren Magnetfeld mit zirkular polarisiertem Röntgenlicht analysiert werden (zirkularer magnetischer Röntgen-Dichroismus, engl. XMCD). Dies gibt Aufschluss über die magnetischen Momente der Elektronen, unterteilt in ihre Spin- und Bahnbeiträge.

### Magnetische Momente von Nickel<sub>2</sub>-Ionen ermittelt

„Durch die besonders tiefen Temperaturen konnten wir erstmals die magnetischen Momente von Nickel-Dimer-Kationen experimentell ermitteln“, erklärt Lau. Die Arbeit an der Ionenfalle ist Teil eines größeren Projekts von HZB und Uni

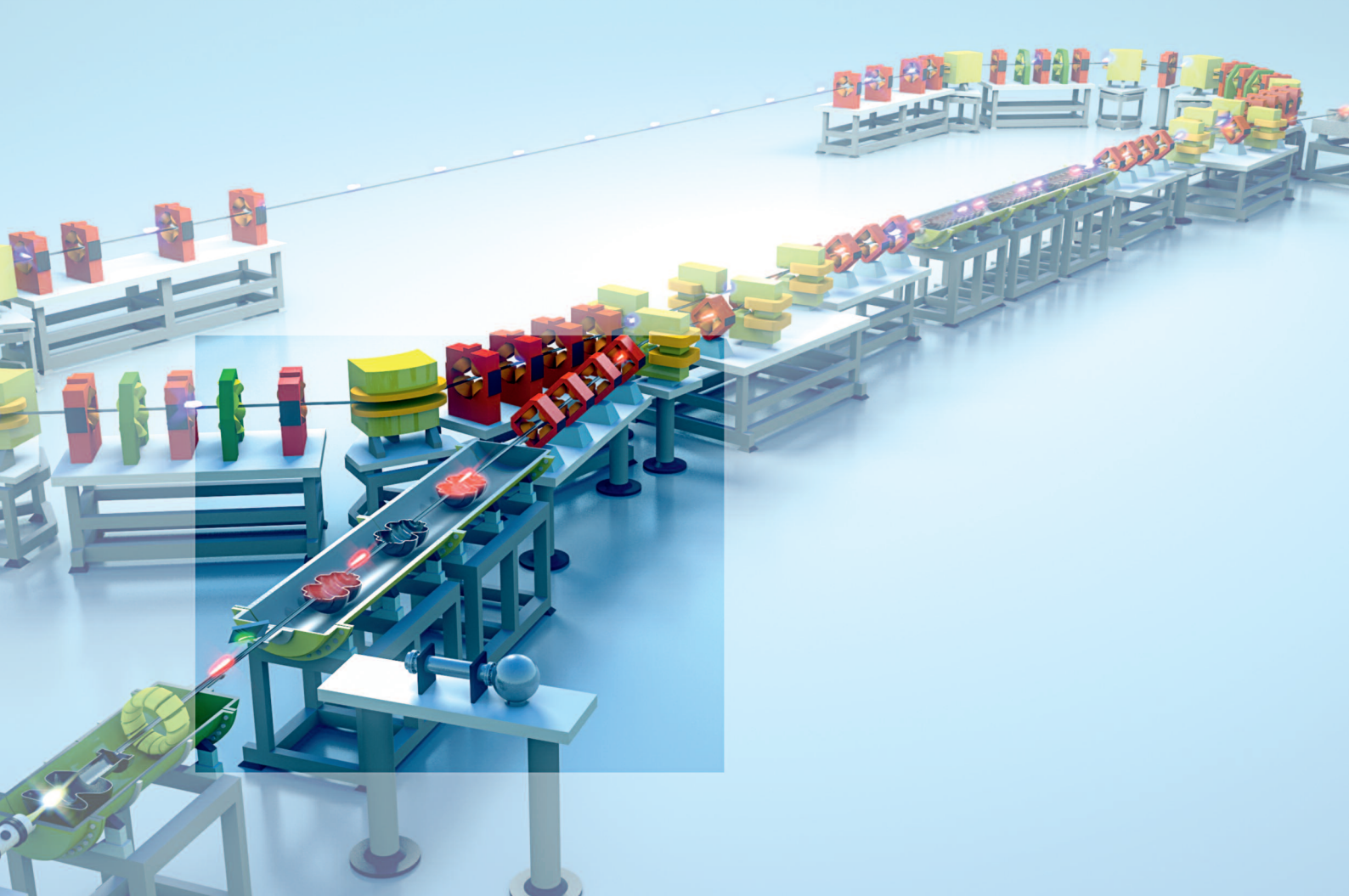


Die zweiatomaren Nickel-Ionen (grau) sind bei tiefen Temperaturen in einer Radiofrequenz-Ionenfalle gefangen, dabei dient kaltes Helium-Gas (blau) zur Wärmeabfuhr. Das magnetische Feld richtet die Ionen aus.

Freiburg, das durch das BMBF gefördert wird. „Wir arbeiten nun daran, noch tiefere Temperaturen zu erreichen. Wir hoffen, dass wir bald bis auf fünf Kelvin kommen“, sagt Zamudio-Bayer. Denn je tiefer die Temperatur, desto deutlicher zeigen sich magnetische Effekte.

Alle Nutzer der Ionenfalle an der UE52-PGM-Endstation an BESSY II können jetzt schon von dem Rekord profitieren. „Hier lassen sich nicht nur der Magnetismus, sondern auch viele weitere Eigenschaften von ganz unterschiedlichen Molekülen spektroskopisch untersuchen, zum Beispiel auch von Übergangsmetall-Komplex-Ionen. Das wird also für viele Nutzergruppen, insbesondere aus der physikalischen Chemie, attraktiv sein“, meint Lau. arö

Journal of Chemical Physics 145, 194302, 2016 (DOI: 10.1063/1.4967821): Electronic ground state of Ni<sub>2</sub>., V. Zamudio-Bayer, R. Lindblad, C. Bülow, G. Leistner, A. Terasaki, B. v. Issendorff and J. T. Lau



# BESCHLEUNIGERFORSCHUNG UND -WEITERENTWICKLUNG

**HZB baut neues Anwendungslabor:** Das HZB erhält 7,4 Millionen Euro aus dem Europäischen Fonds für Regionale Entwicklung (EFRE). Mit dem Geld wird das Anwendungslabor „SupraLab@HZB“ zur Weiterentwicklung von supraleitenden Hochstrom-Kavitäten aufgebaut. Solche Komponenten werden für den Betrieb von neuartigen, leistungsfähigen Synchrotronquellen der nächsten Generation benötigt. Das Labor wird auch komplexe Testvorrichtungen für supraleitende Komponenten bereitstellen, die Unternehmen und Forschungsinstitute der Region nutzen können.

Beim Aufbau des neuen Applikationslabors bringt das HZB seine international anerkannte Expertise bei der Entwicklung von Dauerstrich-supraleitenden Beschleunigerkomponenten (continuous wave [CW]) ein. „Der Vorteil von CW-supraleiten-

den Kavitäten ist, dass ein sehr hohes Beschleunigungsfeld dauerhaft vorhanden ist, und gleichzeitig die Freiheit besteht, die Geometrie für Hochstrombetrieb zu optimieren“, sagt Prof. Dr. Jens Knobloch, Leiter des HZB-Instituts „SRF-Wissenschaft und Technologie“ (ISRF), das die wissenschaftlich-technische Leitung für das SupraLab übernommen hat: „Dadurch kann nicht nur ein hoher Elektronenstrom beschleunigt werden, sondern auch die Zeitstruktur. Die Pulsfolge des Stroms ist nahezu frei wählbar. Mit der EFRE-Förderung haben wir nun die Möglichkeit, diese Technologie substanziell weiterzuentwickeln, bis sie in Lichtquellen einsatzfähig ist.“ Das Projekt wird seit 1. Januar 2017 gefördert und läuft bis Ende 2019. Das HZB trägt einen Eigenanteil von ebenfalls 7,4 Millionen Euro.

## HZB AUF DEM WEG ZUM LINEARBESCHLEUNIGER

Die Halle für „bERLinPro“, die Testanlage eines **Linearbeschleunigers** mit Energierückgewinnung am HZB, steht. Das äußerst komplexe Bauwerk auf dem Wilhelm-Conrad-Röntgen-Campus in Berlin-Adlershof wurde innerhalb von nur zehn Monaten errichtet – Richtfest war im Juli 2016.

**P**rof. Dr. Andreas Jankowiak, Leiter des HZB-Instituts für Beschleunigerphysik und Projektleiter von bERLinPro ist zuversichtlich: „bERLinPro wird ein einmaliges Forschungsinstrument, mit dem wir absolutes Neuland in der Beschleunigertechnologie betreten.“ Es handelt sich dabei um den Prototypen eines Linearbeschleunigers mit Energierückgewinnung: In ihm werden Elektronen unter Einsatz von viel Energie auf nahezu Lichtgeschwindigkeit beschleunigt. In diesem Zustand geben sie Röntgenlicht höchster Qualität ab, das für Forschungszwecke von großem Interesse ist. Nach dem Durchlauf einer Hochgeschwindigkeitsstrecke sollen die Elektronen in bERLinPro wieder aufgefangen werden; ihre Energie will man zurückgewinnen.

„Um bERLinPro zu realisieren, müssen wir die verschiedenen Komponenten und Methoden erst entwickeln und dann in der neuen Beschleunigerhalle testen“, sagt Prof. Dr. Jens Knobloch, Leiter des Instituts SRF – Wissenschaft und Technologie, das maßgeblich an der bERLinPro-Entwicklung beteiligt ist: „Dafür ist eine extrem komplexe Infrastruktur erforderlich.“ Deshalb ist der Bau der Halle ein sehr anspruchsvolles Projekt. „Die Planer mussten beispielsweise die hohen Anforderungen des Strahlenschutzes und der Statik berücksichtigen. Daher stellte bereits die Errichtung des Rohbaus eine enorme Herausforderung für die am Bau beteiligten Firmen und deren Mitarbeiter dar. Nicht minder anspruchsvoll ist die Realisierung der technischen Infrastruktur zum Beispiel zur Kühlung des supraleitenden Test-Beschleunigers, die nun in Angriff genommen wird“, erklärt Dr. Birgit Schröder-Smeibidl, bis Herbst 2016 Leiterin der HZB-Hauptabteilung Facility Management, unter deren Federführung die Halle errichtet wurde. Constanze Tibes, Architektin des Gebäudes (DGI-Bauwerk), ergänzt: „Die Planungen für die Halle waren sehr aufwändig, da es kein Vorbild dafür gab. Wir haben hier ein Unikat für die Wissenschaft errichtet.“ „Diese Leistung in so kurzer Zeit zu vollbringen, war nur deshalb möglich, weil alle Beteiligten hervorragend zusammengearbeitet haben“, hebt der verantwortliche Projektingenieur am HZB, Oliver Schüler, hervor: „Die Kommunikation hat hervorragend funktioniert, und deshalb konnten wir bisher alle Zeit- und Kostenpläne einhalten.“



Fröhliche Gesichter beim Richtfest der neuen Beschleunigerhalle, das bereits zehn Monate nach Beginn der Arbeiten am 27. Juli 2016 gefeiert werden konnte.

### BESSY-VSR: Gleichzeitige Nutzung von langen und kurzen Elektronenpaketen

Etliche Komponenten, die für bERLinPro entwickelt worden sind, können am Elektronenspeicherring BESSY II zum Einsatz gebracht werden. Das gilt beispielsweise für die supraleitenden Hochstromkavitäten, die die Elektronen beschleunigen: Sie sind das Herzstück von BESSY-VSR, dem Variablen Pulslängen-Speicherring, zu dem BESSY II demnächst ausgebaut wird.

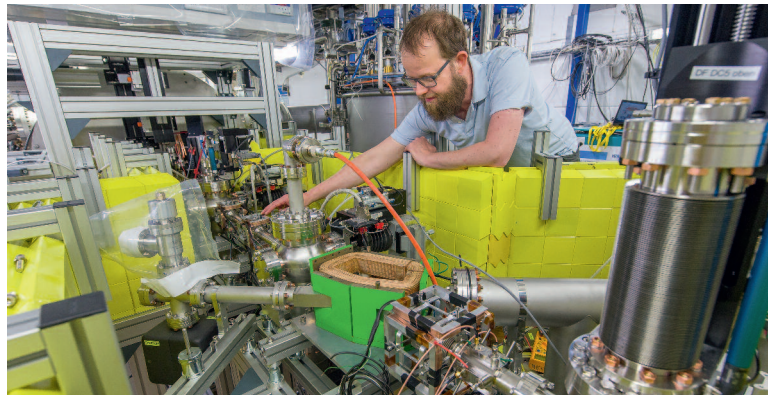
Während sich in BESSY II ausschließlich Elektronenpakete einer bestimmten Länge bewegen, wollen die Forscher in BESSY-VSR zeitgleich lange und kurze Elektronenpakete nutzen, um lange und kurze Lichtpulse im selben Ring zu erzeugen. „Die Synergien zwischen beiden Projekten werden den zukünftigen Nutzern von BESSY-VSR schon zu Gute kommen, während wir an der Testanlage noch die Komponenten für bERLinPro zur Einsatzreife bringen“, sagt Prof. Dr. Anke Kaysser-Pyzalla, bis April 2017 wissenschaftliche Geschäftsführerin des HZB: „Forscher, die insbesondere auf kurze Pulse angewiesen sind, sind begeistert von unserem Konzept für BESSY-VSR und dem Nutzen, den bERLinPro dafür bringt.“

ih

## DIE ELEKTRONENQUELLE NIMMT GESTALT AN

Seit Herbst 2015 baut das HZB an seinem Zukunftsprojekt bERLinPro am Standort Adlershof – eine kompakte Testanlage für einen **Linearbeschleuniger mit Energierückgewinnung (ERL)**. Mit der Anlage zur Erzeugung des Elektronenstrahls hat das Projektteam einen weiteren Schritt auf dem Weg zur Realisierung dieses technologisch einzigartigen Projekts gemacht.

Vor dem Objekt ihrer Anstrengungen finden nicht alle Teammitglieder des Zukunftsprojekts bERLinPro Platz für ein Foto: Der Prototyp der Anlage, die später einmal den Elektronenstrahl für den zukünftigen Linearbeschleuniger mit Energierückgewinnung bERLinPro erzeugen soll, befindet sich in einem als GunLab bezeichneten Raum von etwa 75 Quadratmeter Grundfläche, angefüllt mit Hightech-Geräten. Zu den Wänden bleibt gerade noch so viel Platz, dass zwei Menschen aneinander vorbeipassen, wenn beide den Bauch einziehen. Aber Raum für Fotos ist sowieso nicht das, was für Physiker wie Dr. Thorsten Kamps, Dr. Guido Klemz, Dr. Julius Kühn, Dr. Axel Neumann und etwa zwanzig weitere Teammitglieder eine große Bedeutung hat. Ihnen steht der Sinn nach beschleunigten Elektronenpaketen höchster Brillanz, die sie in Beschleunigeranlagen der Zukunft einspeisen wollen: Etwa in den Prototypen des Linearbeschleunigers mit Energierückgewinnung bERLinPro, der derzeit am HZB entsteht. Im vergangenen Jahr sind sie dafür mit großen Schritten vorangekommen: Die Wissenschaftler und Ingenieure haben vier wesentliche Komponenten, die für die Erzeugung der Elektronenpakete oder -bunche erforderlich sind, bis zur Testreife entwickelt und gebaut: Eine Halbleiter-Photokathode aus Kalium-Cäsium-Antimonid, aus der die Elektronen herausgelöst werden; einen Laser, der Lichtpulse in unterschiedlichen Wellen- und Pulslängen auf die Kathode schießen kann; eine supraleitende Hochfrequenz-Kavität in einer Kälteanlage, einem sogenannten Kryomodul, in der die Bunche auf sehr kurzer Strecke mit elektromagnetischen Feldern nahezu auf Lichtgeschwindigkeit beschleunigt werden; und eine Strahldiagnose-Beamline, in der wichtige Strahlparameter in Länge, Form und Emittanz (das Produkt aus Winkeldivergenz und Strahlfläche) exakt vermessen werden können. Photokathode, Laser, Hochfrequenz-Kavität und Strahlführung können nun im GunLab miteinander verbunden und gemeinsam getestet werden.



Dr. Thorsten Kamps vom HZB-Institut für Beschleunigerphysik ist Teil des Teams, das im GunLab die Anlage zur Erzeugung des Elektronenstrahls für bERLinPro entwickelt.

Anfang 2018 soll die Erzeugung des Elektronenstrahls dann in einem Stadium sein, in dem sie auf bERLinPro übertragen werden kann.

### Reproduzierbare Kathoden mit großer Quanteneffizienz

Verantwortlich für die Photokathode ist Julius Kühn. Gemeinsam mit seinen Mitarbeitern hat er untersucht, unter welchen Bedingungen Kalium und Cäsium mit Antimon so reagieren, dass eine Halbleiter-Kathode mit hoher Quanteneffizienz entsteht: „Im Kathodenlabor haben wir die Bestandteile in unterschiedlichen Mengenverhältnissen und Reihenfolgen auf polierte und hochreine Plugs aus Molybdän aufgedampft und dann vor Ort direkt die Leistungsfähigkeit der Kathode gemessen“, erklärt Kühn: „Wir arbeiten an einem optimierten Herstellungsverfahren, mit dem sich die Kathoden reproduzierbar und mit großer Quanteneffizienz herstellen lassen. Große Quanteneffizienz bedeutet, dass möglichst viele Elektronen von einem Photon aus der Oberfläche herausgeschlagen werden.“ Die Photonen stellt ein Hochleistungslaser in Form von ultra-kurzen Lichtpulsen zur Verfügung, wie Guido Klemz erläutert. Klemz ist zuständig für die Lasertechnologie bei

Photoinjektoren und Beschleunigern: „Wir haben einen bereits existierenden Laser so weiter entwickelt, dass er jetzt Lichtpulse mit einer variablen Länge von zehn bis 20 Pikosekunden und unterschiedlichen Wellenlängen erzeugen kann.“ Die Variabilität bei den Wellenlängen, und damit der Energie der Photonen, ist erforderlich, weil die Forscher bei der Erzeugung des Elektronenstrahls zunächst mit einer einfachen Kupfer-Photokathode arbeiten, bevor die vakuumtechnisch anspruchsvollere Halbleiter-Photokathode zum Einsatz kommt.

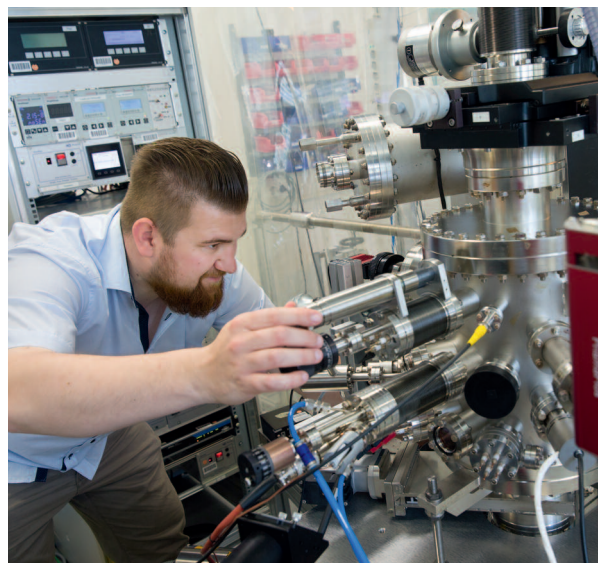
Die Kupfer-Kathode ist sehr stabil und hat eine ausreichende Quanteneffizienz, wenn sie mit ultraviolettem Licht bestrahlt wird. Die später zum Einsatz kommende Halbleiter-Photokathode aus Kalium-Cäsium-Antimonid hat eine hohe Quanteneffizienz im grünen Bereich des Lichtspektrums. „Diese unterschiedlichen Wellenlängen können wir durch spezielle Optiken erzeugen, in denen das Licht optisch nichtlineare Kristalle durchläuft“, sagt Guido Klemz.

Bei der Entwicklung ihres Hochleistungslasers haben die HZB-Wissenschaftler intensiv mit dem Max-Born-Institut (MBI) zusammengearbeitet. „Diese Kooperation werden wir auch bei der Entwicklung des Lasersystems fortsetzen, das später für bERLinPro erforderlich ist“, sagt Prof. Dr. Andreas Jankowiak, Leiter des HZB-Instituts Beschleunigerphysik und bERLinPro-Projektleiter: „Die Zusammenarbeit mit den Kollegen vom MBI ist dafür sehr wichtig.“

#### Ein supraleitender Hochfrequenz-Resonator mit äußerster Partikelfreiheit

Laser und Photokathode sind damit in einem Entwicklungszustand, in dem sie auf die dritte wichtige Komponente im GunLab treffen können: Den supraleitenden Hochfrequenz-Resonator, in dem elektro-magnetische Wechselfelder die Elektronenbunche nahezu auf Lichtgeschwindigkeit beschleunigen. Prof. Dr. Jens Knobloch ist Leiter des HZB-Instituts SRF – Wissenschaft und Technologie und damit für die Entwicklung der Resonatoren verantwortlich: „Der Resonator, der in Zusammenarbeit mit dem US-amerikanischen Jefferson-Lab entstanden ist, ist äußerst empfindlich gegenüber Verunreinigungen schon durch winzigste Fremdpartikel, wie zum Beispiel kleinste Staubteilchen mit wenigen Tausendstel Millimeter Durchmesser.“ Der Ein- und Anbau von Kühleinheiten, Hochfrequenzsendern und den anderen Komponenten musste deshalb im Reinraum und unter äußerster Partikelfreiheit ablaufen.

Das ist dem Team tatsächlich gelungen, wie die ersten Tests der Hochfrequenzeigenschaften gezeigt haben. „Der Resonator baut stabile und sehr hohe Felder auf“, sagt Axel Neumann, Physiker in Knoblochs Team und wesentlich an der Entwicklung und Installation des Resonators beteiligt: „Die geplanten Werte werden exakt erreicht; die Abweichungen liegen im Bereich der Messungenauigkeiten. Als nächstes können wir tatsächlich die



Dr. Julius Kühn im Photo-Kathodenlabor, in dem die Halbleiter-Kathode erforscht wurde.

Photokathode installieren und mit Lichtpulsen aus dem Laser beschießen.“

Auch dabei sind dauernd höchste Präzision und Aufmerksamkeit erforderlich, damit der Resonator keinerlei Verunreinigungen erfährt. Ob das gelingt, werden die Tests der kompletten Anlage in der zweiten Jahreshälfte 2017 zeigen. „Bis Ende Januar 2018 müssen wir mit allen Tests durch sein“, sagt Thorsten Kamps vom Institut für Beschleunigerphysik: „Wenn alles gut geht, haben wir dann gezeigt, wie eine weltweit einmalige Elektronenquelle gebaut werden kann, mit der wir bERLinPro mit Elektronenpaketen höchster Qualität starten können.“ Dann wird es darum gehen, die Elektronen auf hohe Energie zu beschleunigen und diese Energie nach ihrem Durchlauf durch die Anlage wieder zurück zu gewinnen. Für Herausforderungen auch in Zukunft ist also gesorgt.

hs

#### ZUSAMMENGEFASST

- Das HZB entwickelt auf dem Wilhelm-Conrad-Röntgen-Campus in Berlin-Adlershof einen Prototypen des Linearbeschleunigers mit Energierückgewinnung bERLinPro.
- Die Wissenschaftler und Ingenieure haben vier wesentliche Komponenten, die für die Erzeugung der Elektronenpakete oder -bunche erforderlich sind, bis zur Testreife entwickelt und gebaut.
- Bis Ende Januar 2018 wollen sie in umfangreichen Tests zeigen, wie eine weltweit einmalige Elektronenquelle gebaut werden kann, um mit bERLinPro Elektronenpakete höchster Qualität zu erzeugen.



Heiß begehrt: Die 11.992,5 an der Synchrotronquelle BESSY II verfügbaren Experimentenschichten (zu je 8 Stunden) an 26 Instrumenten wurden 2016 zu 100 Prozent genutzt.



Langfristig geplant: Das Helmholtz-Zentrum Berlin ist eines von sieben Helmholtz-Zentren, die an Systemlösungen für die künftige Energieversorgung arbeiten.

## ZAHLEN UND FAKTEN AUS DEM HZB

# 7.504

Stunden (938 Schichten, 312,67 Tage) wurde die Speicherringanlage BESSY II im Jahr 2016 für die wissenschaftliche Nutzung betrieben. Das entspricht einer Verfügbarkeit von 69 Prozent. 1.168 Stunden (146 Schichten, 48,67 Tage) waren für Beschleunigerstudien reserviert.

# 26

Prozent betrug 2016 die HZB-interne Nutzung der Strahlzeit an BESSY II.

# 137

Kooperationen unterhielt das HZB Ende 2016 mit anderen wissenschaftlichen Einrichtungen.

# 76

Kooperationen ist das HZB allein im Jahr 2016 mit Unternehmen neu eingegangen. Damit hat sich die Gesamtzahl der laufenden Partnerschaften mit der Industrie von 53 im Vorjahr auf 109 mehr als verdoppelt. Davon entfielen fast 46 Prozent auf die Zusammenarbeit mit Unternehmen aus dem Ausland und fast 30 Prozent auf Kooperationen mit kleinen und mittleren Unternehmen.

# 45

Jugendliche und junge Erwachsene befanden sich Ende 2016 am HZB in Ausbildung, darunter 14 Studierende, die den Bachelor of Science (BA) in den Bereichen Technische Informatik (12) und Maschinenbau (2) anstrebten. Zudem bildet das HZB 31 junge Menschen in sieben Ausbildungsberufen aus, darunter sechs Fachinformatiker „Systemintegration“ sowie je vier Feinwerkmechaniker, Mechatroniker und einen Elektroniker für Betriebstechnik. Im Geschäftsjahr 2016 hat das HZB insgesamt elf neue Ausbildungsverträge mit Auszubildenden abgeschlossen. Im Rahmen der Verbundausbildung mit dem Helmholtz-Zentrum Potsdam wurden zusätzlich vier Auszubildende zum Physiklaboranten für einen einjährigen Ausbildungsabschnitt im HZB aufgenommen.

# 22

Prozent beträgt der Frauenanteil beim 664 Mitarbeiter umfassenden wissenschaftlichen Personal am HZB. Gemessen an der Gesamtzahl der 1.141 Beschäftigten liegt der Frauenanteil bei 28,2 Prozent.

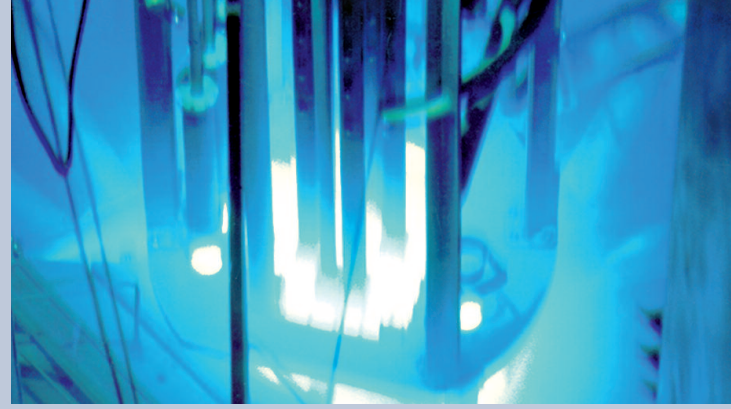
# 10

Patente wurden dem HZB 2016 erteilt. Zum Jahresende 2016 umfasste der Patentbestand des HZB 251 Patente. 21 Patente sind Gegenstand laufender Lizenzverträge. Neun Erfindungen aus dem Jahr 2016 werden durch das HZB oder externe Technologieexperten hinsichtlich ihrer Patentierbarkeit und/oder wirtschaftlichen Verwertbarkeit evaluiert.





Sehr beliebt: Die beiden Schülerlabore des HZB bieten Projektstage für Grund- und Oberschulen sowie Lehrerfortbildungen an. Das Experimentieren bringt die Kinder und Jugendlichen spielerisch mit Wissenschaft in Berührung.



Gut ausgelastet: 2016 stand der Forschungsreaktor BER II an 1.659,5 Instrumenttagen für den regulären Nutzerbetrieb zur Verfügung. Ende 2019 wird der Betrieb von BER II dann eingestellt.

# 197

Doktoranden wurden 2016 vom HZB betreut. 31 Dissertationen wurden im vergangenen Jahr abgeschlossen.

# 6,786

Millionen Euro nahm das HZB 2016 aus dem Technologietransfer ein. Etwas mehr als eine Million Euro stammten aus Forschungs- und Entwicklungs-Kooperationen und FuE-Aufträgen mit Wirtschaftsunternehmen aus dem In- und Ausland, circa 3,3 Millionen Euro aus anderen FuE-Kooperationen. Aus Infrastrukturverträgen stammten weitere rund 2,2 Millionen Euro.

# 457

ISI- oder SCOPUS-zitierte Publikationen wurden 2016 von den Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern am HZB veröffentlicht.

# 175,5

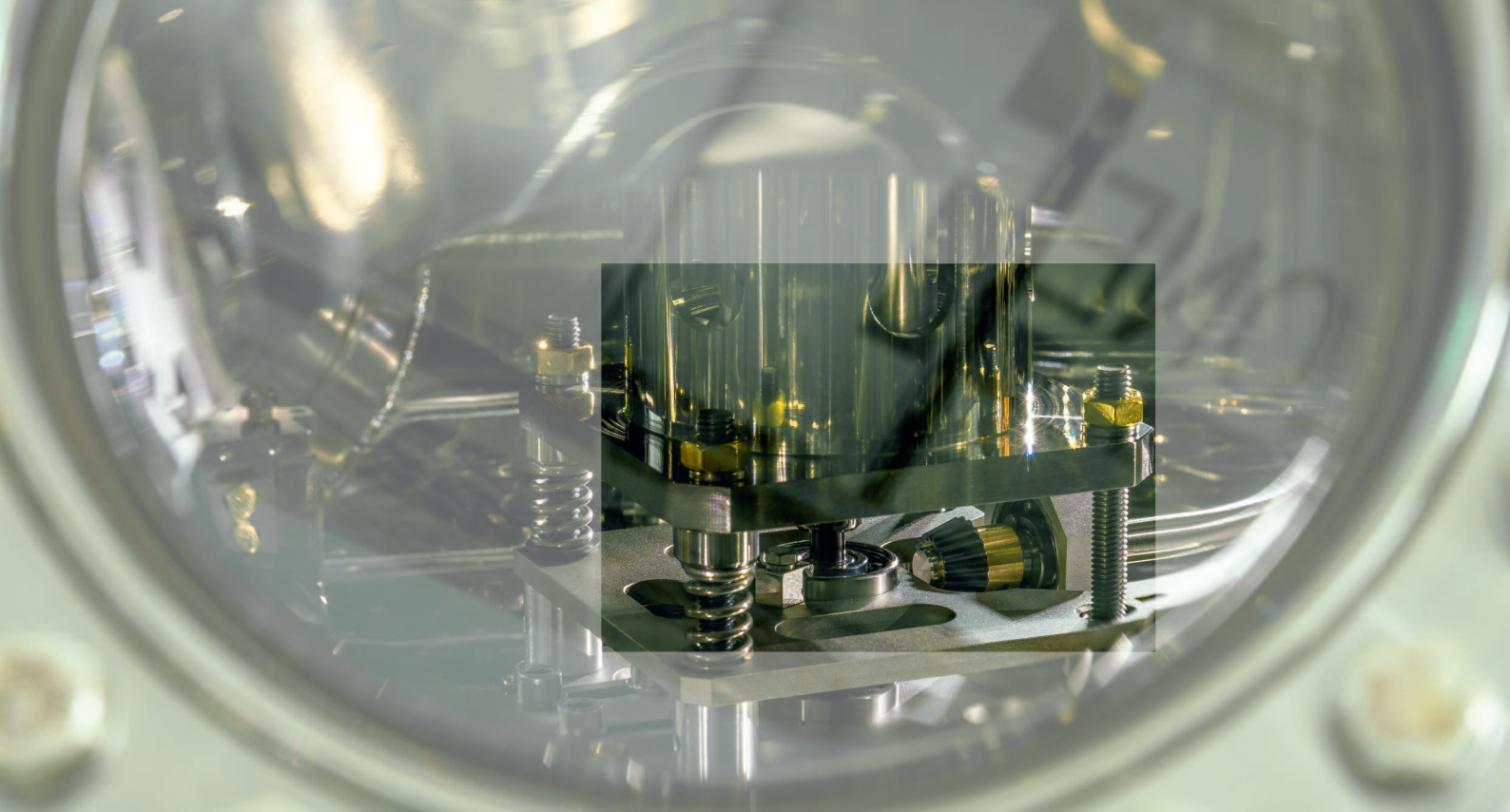
Tag in elf Reaktorzyklen war der Forschungsreaktor BER II im Jahr 2016 auf Leistungsbetrieb. Damit war an den 13 Instrumenten im ersten und neun Instrumenten im zweiten Halbjahr an insgesamt 1.659,5 Instrumenttagen ein regulärer Nutzerbetrieb möglich. 272 Instrumenttage wurden für die Instrumententwicklung und Wartung benötigt, weitere 49 für das endgültige Commissioning des Hochfeldmagneten/Extreme Environment Diffractometers (EXED) genutzt. Ein Tag stand aus technischen Gründen an den Instrumenten nicht zur Verfügung. Die verbleibenden 1.337,5 Experimenttage konnten die internen und externen Forscher für ihre Messungen und Experimente nutzen.

# 22,8

Millionen Euro an Drittmittelträgen konnte das HZB 2016 verbuchen. Darin enthalten sind etwa 5,4 Millionen Euro aus Auftragsforschung, 3,66 Millionen Euro aus Leistungen an Dritte, circa 2,9 Millionen Euro Projektförderung des Bundes und fast zwei Millionen Euro von der Europäischen Union.

# 2.800

Schülerinnen und Schüler besuchten 2016 die beiden Schülerlabore an den Standorten Wannsee und Adlershof. Vier Gruppen kamen aus dem Ausland, vier im Rahmen von Kurs- und Klassenfahrten aus anderen Bundesländern.



## HIGHLIGHTS AUS DEN NUTZEREXPERIMENTEN

**Auf dem 8. BER II- und BESSY II-Nutzertreffen**, das im Dezember 2016 stattfand, wurden gleich zwei Wissenschaftler mit dem Ernst-Eckhard-Koch-Preis für eine herausragende Promotionsarbeit auf dem Gebiet der Forschung mit Synchrotronstrahlung geehrt: **Dr. Joachim Robert Gräfe** vom Max-Planck-Institut für Intelligente Systeme in Stuttgart wurde für seine Promotionsarbeit „Statische und dynamische Magnetisierungseigenschaften nanoskaliger Überstrukturen“ an der Universität Stuttgart ausgezeichnet. In seiner Arbeit konnte er weltweit erstmalig Spinwellen, sogenannte Magnonen, in nanoskaligen Antidotgittern direkt mit Hilfe der dynamischen Röntgenmikroskopie auf der Gigahertz-Skala abbilden und auswerten. Die Experimente dazu fanden am MAXYMUS-Mikroskop bei BESSY II statt.

**Dr. Jan Wernecke**, inzwischen in der Industrie bei der Firma IAV in Gifhorn tätig, wurde für seine Promotionsarbeit „When size does matter: Dimensional metrology of

nanostructured layers and surfaces using X-rays“ an der Technischen Universität Berlin ausgezeichnet, die er an der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt bei BESSY II durchgeführt hat. Die zentrale Aufgabe bestand darin, die Röntgenkleinwinkelstreuung zur Messung von Nanostrukturgrößen auf Oberflächen einzusetzen und dabei eine messtechnische Rückführung auf das internationale Einheitensystem SI mit Unsicherheiten im Bereich weniger Atomdurchmesser zu realisieren.

**Dr. Christian Tusche** vom Forschungszentrum Jülich wurde im Rahmen des Nutzertreffens mit dem Innovationspreis „Synchrotronstrahlung 2016“ ausgezeichnet. Mit seinen bahnbrechenden Arbeiten zu „Imaging spin-filters for spin-resolving momentum microscopy“, die im Wesentlichen am Max-Planck-Institut (MPI) für Mikrostrukturphysik in Halle und bei BESSY II entstanden sind, lässt sich die Effizienz der spinaufgelösten Elektronenspektroskopie um bis zu vier Größenordnungen erhöhen.

## X-RAY CORELAB STEHT BEREIT

Das HZB bietet Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern vielfältige **Röntgendiffraktometrie-Geräte** gebündelt am X-Ray CoreLab zur Nutzung an. Jedes Instrument ist auf bestimmte Untersuchungen spezialisiert – und technisch auf dem neuesten Stand.

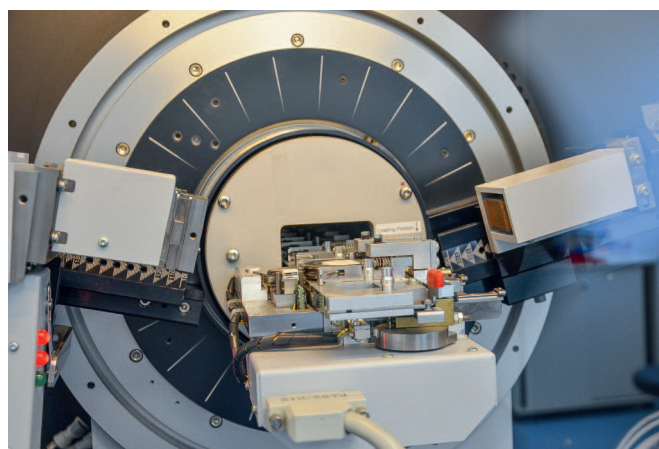
Die Röntgendiffraktometrie gehört zu den wichtigsten Analyse-Methoden in der Materialforschung. Auch am HZB wird die Methode vielfach genutzt, um neue Materialien beispielsweise für die Energieumwandlung oder -speicherung zu entwickeln. Sie eignet sich sowohl für die Dünnschichtanalytik als auch für die Analyse von Pulverproben und Einkristallen, also für die klassische Kristallstrukturanalyse. An BESSY II gibt es mehrere Instrumente, mit denen man komplexe Dünnschichtsysteme untersuchen kann. Weil aber nicht jedes Experiment der hochintensiven, brillanten Synchrotronstrahlung aus dem Speicherring bedarf, gibt es Instrumente, die im Labor mit einer klassischen Röntgenquelle betrieben werden.

Diese über die Standorte verteilten Geräte hat das HZB nun im sogenannten X-Ray CoreLab zusammengeführt. Sie stehen damit allen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern zur Verfügung. Die Idee wurde von Prof. Dr. Christoph Genzel initiiert und von Prof. Dr. Susan Schorr weiterentwickelt, die Vorsitzende des X-Ray CoreLab Steering Committees ist.

### Textur- und Epitaxie-Untersuchungen möglich

Auf dem Lise-Meitner-Campus am HZB-Standort in Wannsee wurden dafür neue Laborräume im Keller des PT-Gebäudes hergerichtet. Dort stehen nun fünf Röntgendiffraktometer für die Analytik von Dünnschichten und Pulverproben und zwei für die Untersuchung von Einkristallen zur Verfügung. „Mit dem Umzug wurden alle Instrumente auf den aktuellen technischen Stand gebracht und mit neuester Hard- und Software ausgestattet“, sagt Dr. Michael Tovar, der dort für den Laborbetrieb verantwortlich ist. Damit gibt es nun auch die Möglichkeit, Textur- und Epitaxie-Untersuchungen an Dünnschichten durchzuführen, was bisher ein Engpass in Wannsee war.

Das X-Ray CoreLab auf dem Wilhem-Conrad-Röntgen-Campus am HZB-Standort in Adlershof steht unter der Verantwortung von Christoph Genzel und umfasst drei Geräte. Zwei Diffraktometer stehen im Labor R 6106, darunter ein neues 8-Kreis Diffraktometer. Sie sind spezialisiert auf tiefenabhängige Mikrodiffraktion und Stressanalytik.



Die Röntgendiffraktometer im X-Ray CoreLab stehen allen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern zur Verfügung.

Zu den Spitzengeräten im neuen X-Ray CoreLab gehören zwei MetalJet-Hochflussquellen, von denen jeweils eine am Standort Wannsee (Raum LS012) und eine am Standort Adlershof im EMIL-Labor steht. Die MetalJet-Quellen sind noch im Aufbau begriffen und werden nach erfolgreichem Commissioning den CoreLab-Nutzern zur Verfügung stehen.

### Messzeit über Online-Kalender

Die Instrumente des X-Ray CoreLabs stehen allen Mitarbeitenden sowie seit 2017 auch den Gästen des HZB für ihre Forschung zur Verfügung. Wer ein Instrument nutzen möchte, muss sich zunächst als Nutzer des X-Ray CoreLabs registrieren. „Mithilfe unseres Gerätepools im X-Ray CoreLab lassen sich zahlreiche Fragestellungen beantworten, die nicht unbedingt ein Großgerät wie BESSY II erfordern. Denn dort ist Messzeit teuer und vor allem stark begrenzt“, sagt Susan Schorr. Die Laborinfrastrukturen ergänzen damit die Forschung an den Großgeräten optimal und sind ein wichtiger Baustein in der neuen HZB-Strategie. Die Webseiten des X-Ray CoreLabs unter [www.helmholtz-berlin.de/forschung](http://www.helmholtz-berlin.de/forschung) informieren über die Spezifikationen der Instrumente sowie über die Ansprechpartner. *red*

## WIE WASSER GLAS BEWEGT

Ein Team am Lehrstuhl für Biogene Polymere der Technischen Universität München (TUM) am Wissenschaftszentrum Straubing (WZS) hat mit einem **künstlich versteinerten Kiefernzapfen** die Grundlagen für neue Sensoren geschaffen.

**P**flanzen nutzen Kapillarkräfte, um Flüssigkeit hochzuziehen. Dafür besitzen sie ein Netz aus dünnen Röhren, den sogenannten Kapillaren, das auch dafür sorgt, dass sich das Material bei Flüssigkeitsaufnahme ausdehnt. Auch bei Zapfen von Nadelbäumen verhält es sich so. Die Frage der Forscher war, ob sich dieser Effekt auch anderweitig nutzen lässt. „Wir haben ein zuvor entwickeltes und verfeinertes ‚Bio-Templatierungsverfahren‘ zum ersten Mal für die Herstellung eines Materials mit strukturbasierter Funktion verwendet“, sagt Dr. Daniel Van Opdenbosch vom WZS. Mit dem Bio-Templatierungsverfahren lassen sich Kiefernzapfen künstlich versteinern: Die biologischen Be-



Eine neue Generation von Sensoren: Die Schuppen des „versteinerten“ Kiefernzapfens biegen sich bei Befeuchtung gegen die Schwerkraft aufwärts und beim Trocknen wieder zurück.

standteile werden vollständig in das technische Material Silikatglas umgewandelt. Aufwändige Untersuchungen an der  $\mu$ Spot-Beamline der Synchrotronquelle BESSY II in Berlin zeigten, dass dabei die innere Struktur des Kiefernzapfens erhalten blieb. „Die  $\mu$ Spot wurde konzipiert, um viele unterschiedliche Methoden an hierarchisch aufgebauten Proben wie Holz, Knochen, Katalysatoren oder archäologischen Funden zerstörungsfrei anzuwenden. Wir nutzen Absorptionsspektroskopie, um die atomaren Eigenschaften zu untersuchen,

Raman-Spektroskopie für die molekulare Zusammensetzung, Diffraktion für die kristalline Struktur und Kleinwinkelstreuung für die Nanostruktur“, erläutert Dr. Ivo Zizak, der die Beamline beim HZB verantwortet. „Ein Online-Mikroskop liefert die makroskopische Struktur der Probe. Der Röntgenstrahl wird auf wenige Mikrometer fokussiert, und durch 2- oder 3-D-Rastern können wir die mikroskopische Information mit der makroskopischen kombinieren.“ Diese Kombination in einem Experiment ermöglicht es, die Abhängigkeit zwischen der kristallinen Struktur und der atomaren Zusammensetzung zu untersuchen. An dem Zapfen wurden mittels Kleinwinkelstreuung die Nanostrukturen, insbesondere die Ausrichtung der Fibrille und die Porengröße, in Abhängigkeit von der Position in der Zapfenschuppe untersucht.

### Sensoren mit geringem Technikaufwand herstellbar

Durch das neue Bio-Templatierungsverfahren, an dem auch eine Gruppe vom Institut für Physik der Montanuniversität Leoben beteiligt war, wurde der Zapfen komplett versteinert bis hinunter auf die Ebene von Millionstel-Millimetern. „Wir konnten zeigen, dass sich der transformierte Körper wie sein biologisches Original bei Feuchtigkeitsaufnahme bewegt“, erklärt Van Opdenbosch weiter, „die Schuppen der versteinerten Zapfen biegen sich bei Befeuchtung gegen die Schwerkraft aufwärts und beim Trocknen wieder zurück in ihre Ausgangsposition.“ Durch das genaue Abformen von Pflanzenstrukturen bei Erhalt ihrer charakteristischen Eigenschaften versprechen sich die Wissenschaftler neue Möglichkeiten bei der Entwicklung von Funktionsmaterialien.

Basierend auf den bisherigen Ergebnissen könnten poröse keramische, mehrlagige Sensoren mit einem relativ geringen technischen Aufwand produziert werden. Sie reagieren auf Feuchtigkeitsveränderung mit Bewegung. Damit ließen sie sich, so Van Opdenbosch, in chemisch aggressiven und physikalisch anspruchsvollen Umgebungen einsetzen, um verlässlich messen, schalten und steuern zu können. *ew*

Advanced Materials, Vol. 28, Issue 26, pp 5235-5240 (DOI: 10.1002/adma.20160 0117): Moisture-Driven Ceramic Bilayer Actuators from a Biotemplating Approach; D. Van Opdenbosch et. al.

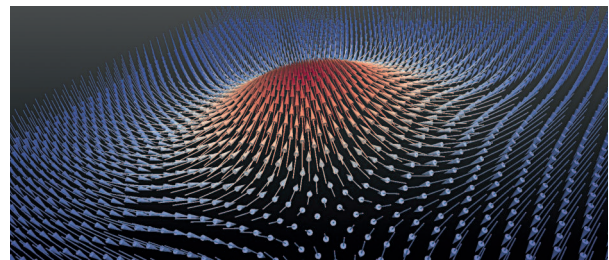
## PING-PONG MIT SKYRMIONEN

Bizarre Wirbel in Magnetfeldern – sogenannte Skyrmionen – könnten in Zukunft ein Baustein für neuartige Speichermedien werden. Zwei internationale Forschungsteams haben mit ihren Arbeiten am HZB dafür eine Basis geschaffen.

Der Name dieses sonderbaren Festkörper-Phänomens klingt ein wenig wie Science-Fiction. Skyrmionen, das sind bis zu wenige Nanometer kleine magnetische Strukturen, die ein wenig wie der Haarwirbel auf dem Hinterkopf aussehen und ebenso wie dieser nur schwer zu glätten sind. 2009 gelang es Forschern erstmals, sie im Experiment zu beobachten – allerdings nur unter extremen Bedingungen: in einem exotischen Kristall und bei Temperaturen nahe dem absoluten Nullpunkt. An praktische Anwendungen ist bei solchen Konditionen nicht zu denken. Trotzdem sind Skyrmionen nicht nur ein ungewöhnliches magnetisches Modellsystem, sondern ernsthafte Kandidaten für künftige kompakte und energiesparende Datenspeicher.

Denn sowohl ihre kleinen Dimensionen, ihre im Vergleich zu anderen Strukturen hohe Stabilität und geringe Beeinflussbarkeit durch lokale Defekte im Material als auch die Tatsache, dass sie sich durch elektrischen Strom beeinflussen lassen, können von großem Nutzen sein.

Die Resultate zweier internationaler Forschungsteams am HZB haben das Ziel der Nutzung von Skyrmionen in der Datenverarbeitung nun ein gutes Stück näher gerückt. So zeigten Wissenschaftler um Seonghoon Woo vom MIT in Cambridge, dass sich die Magnetwirbel auch in konventionellen ferromagnetischen Materialien erzeugen lassen, die in mehreren ultradünnen Schichten übereinanderliegen. Und das sogar bei Raumtemperatur. Zudem gelang es Woo und seinen Kollegen, die Wirbelpäckchen durch Stromimpulse gezielt zwischen zwei Positionen hin und her zu schieben. Position und Abstand der Skyrmionen könnten etwa digitale Zustände wie „Eins“ und „Null“ repräsentieren. Jedes Skyrmion, so die Idee, wäre damit ein einzelnes Datenbit – eine Aufgabe, die in heutigen Speichermedien weit größere beziehungsweise örtlich gebundene Pakete übernehmen. Für die Anwendung zum Speichern, Auslesen und Löschen von Daten muss die Manipulation der Wirbel allerdings nicht nur einmal gelingen, sondern beliebig oft wiederholbar sein. Dass das möglich ist, belegen die Resultate von Experimenten eines Teams um Kai Litzius vom Institut für Physik der Universität Mainz. Die Forscher nutzten dazu den sogenannten Hall-Effekt: Ein Magnetfeld senkrecht zu bewegten



Die magnetische Struktur eines Skyrmions ordnet sich symmetrisch um dessen Kern an, wodurch es von allen Seiten identisch wirkt. In dieser Abbildung zeigen die Pfeile die Ausrichtung der Spins an.

elektrischen Ladungen lenkt diese von ihrer Bahn ab. Umgekehrt kann elektrischer Strom in bestimmten Materialien, meist dünnen Schichten aus Schwermetallen, auch eine Ansammlung von magnetischen Momenten (Spins) erzeugen, die wiederum zu einer Veränderung der Spinstruktur in einer zweiten magnetischen Schicht führt. Damit lassen sich die Skyrmionen effizient und reproduzierbar vor- und zurückverschieben, wie Litzius und seine Kollegen nachweisen konnten. „Die kontrollierte Auslenkung der magnetischen Wirbel gelang mehr als eine Milliarde Mal zuverlässig und fehlerfrei“, berichtet Dr. Markus Weigand. Er leitet die Arbeitsgruppe Röntgenmikroskopie in der Abteilung Moderne magnetische Strukturen am MPI für Intelligente Systeme, die am HZB ein hochauflösendes Röntgenmikroskop betreibt. Diese Anlage nutzten beide Forscherteams für ihre Versuche an Skyrmionen.

Weigand sieht in den Ergebnissen „einen Riesenschritt vorwärts – auf dem Weg hin zu komplexen Systemen von Skyrmionen“. Zum Beispiel zu extrem kleinen und sehr effizienten Speichermedien. Von wegen Science-Fiction! *rb*

Nature Materials, 15, 501-506, 2016 (DOI: 10.1038/nmat4593): Observation of room-temperature magnetic skyrmions and their current-driven dynamics in ultrathin metallic ferromagnets; S. Woo et. al.

Nature Physics, 13, 170-175, 2017 (DOI: 10.1038/nphys4000):

Skyrmion Hall effect revealed by direct time-resolved X-ray

microscopy; K. Litzius et. al.

## DIE KURZE WELLE

In Experimenten am HZB ist es einem internationalen Forscherteam erstmals gelungen, Spinwellen mit sehr kurzen Wellenlängen gezielt zu erzeugen. Dazu nutzten sie Nanoantennen aus **magnetischen Wirbelkernen**. Damit könnte langfristig elektrischer Strom als Basis für digitale Datenverarbeitung abgelöst werden.

**V**iel Energie ist in Rechenzentren nötig, um die Anlage zu kühlen. Denn die Computer produzieren nicht nur Daten, sondern auch reichlich Wärme, die abgeführt werden muss. Schuld daran ist die Reibung, die fließende Elektronen – der elektrische Strom – zu überwinden haben: Sie stoßen auf ihrem Weg durch Leitungen und Chips an Atome und werden unter Wärmeerzeugung gebremst. Wissenschaftler suchen daher nach Alternativen zum elektrischen Strom aus bewegten Ladungsträgern, um digitale Informationen zu übertragen und zu verarbeiten. Ein aussichtsreicher Kandidat dafür sind Spinwellen, also durch das Material wandernde regelmäßige Anregungen von Elektro-



Vereinfachte Darstellung eines Elektronenspins als sich drehender Kreisel, der seitlich geschubst wurde und als Teil einer Spinwelle durch das Material wandert.

nenspins. Der Spin erscheint in einem vereinfachten Bild wie ein sich drehender Kreisel, der seitlich geschubst wurde. Wellenbewegungen der Ausrichtung von Spins können durch ein sich zeitlich änderndes Magnetfeld erzeugt werden. Wie der elektrische Strom, kann auch eine Spinwelle Informationen transportieren. Eine energiezehrende Reibung durch die Bewegung der Elektronen gibt es dabei aber nicht. Um Spinwellen in Prozessoren und Speicherchips mit winzigen Strukturen optimal nutzen zu können, müssen sie jedoch eine sehr kleine Wellenlänge haben. Das erfordert winzige Magnetfeld-Antennen, die sich mit bisherigen Methoden nicht realisieren ließen.

### Wirbelkerne als nanometerkleine Antennen

Anders bei einer neuartigen Methode, die ein Team um den Physiker Dr. Sebastian Wintz vom Helmholtz-Zentrum in Dresden-Rossendorf erstmals anwendete, um kurzwellige Spinwellen zu erzeugen: Die Wissenschaftler nutzten ein wenige Dutzend Nanometer dünnes Plättchen aus zwei dünnen ferromagnetischen Schichten, die durch eine nicht-magnetische Zwischenschicht getrennt waren. „Die Spins ordneten sich auf geschlossenen konzentrischen Kreisen innerhalb der Ebene der Plättchen an – eine Struktur, die als magnetischer Wirbel bekannt ist“, erklärt Wintz. „Im Zentrum des Wirbels, einem Bereich von nur wenigen Nanometern Durchmesser, sind die Spins allerdings gezwungen, sich aufzurichten – senkrecht zur Oberfläche des Plättchens.“

Als Wintz und seine Teamkollegen diese Wirbelkerne mit einem hochfrequenten elektromagnetischen Feld anregten, wirkten sie wie nanometerkleine Antennen. Es formte sich eine Spinwelle. Bei einer bestimmten Dicke der Trennschicht stellte sich ein antiferromagnetisches Verhalten ein: Die Spins in den beiden Plättchen versuchten sich in entgegengesetzten Richtungen zu orientieren. Die Folge: Der Abstand zwischen den „Bergen“ und „Tälern“ der Spinwelle schrumpfte bis auf weniger als 100 Nanometer.

Mit dem leistungsfähigen MAXYMUS-Röntgenmikroskop an BESSY II, das von Forschern der Abteilung Moderne Magnetische Systeme des MPI für Intelligente Systeme (MPI-IS) betrieben wird, gelang es dem Team, die Ausbreitung der Spinwellen direkt abzubilden. „An zeitaufgelösten Röntgenbildern konnten wir zeigen, dass sich die Wellenlänge der Spinwelle durch die Wahl der Anregungsfrequenz präzise einstellen lässt“, sagt Dr. Markus Weigand, Leiter der Arbeitsgruppe Röntgenmikroskopie in der Abteilung Moderne magnetische Materialien am MPI-IS. In ersten Experimenten gelang das bei Frequenzen bis vier Gigahertz. „Inzwischen können wir die Spinwellen bei noch deutlich höheren Frequenzen anregen und beobachten“, freut sich Weigand. Ein wichtiger Schritt hin zur Datenverarbeitung ohne Wärmeverluste – dank Spins. *rb*

Nature Nanotech., 11, 948-953, 2016 (DOI: 10.1038/nnano.2016.117): Magnetic vortex cores as tunable spin-wave emitters; S. Wintz et al.

## WASSEROXIDATION – DYNAMISCHER ALS GEDACHT

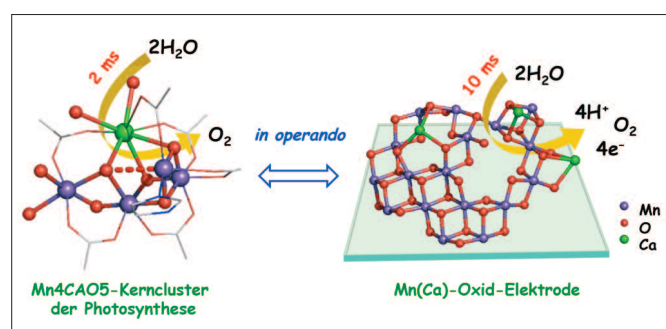
Forschende der Freien Universität Berlin (FUB) und des HZB haben in einem gemeinsamen Projekt untersucht, wie man die künstliche Photosynthese zur Erzeugung nicht-fossiler Treib- und Brennstoffe mithilfe von **Mangan-basierten Oxiden** als Katalysatoren verbessern kann.

In Pflanzen, Algen und Cyanobakterien bewirkt Sonnenlicht die Aufspaltung von Wassermolekülen, wodurch molekularer Sauerstoff ( $O_2$ ), Protonen und energetisierte Elektronen entstehen. Letztere sind für die  $CO_2$ -Reduktion und die Bildung von Kohlenhydraten erforderlich, die der unersetzliche „Treibstoff“ für das Leben auf der Erde sind. Diese Katalyse der Wasseroxidation ist nicht nur für die biologische Photosynthese, sondern auch für Technologien zur Erzeugung nicht-fossiler Brennstoffe entscheidend. In der biologischen Photosynthese katalysiert ein Mangan-Komplex – der  $Mn_4CaO_5$ -Kerncluster – die Wasseroxidationsreaktion. Dieser Komplex wird durch vier endständige Wasserliganden ergänzt und ist in einen als Photosystem II (PSII) bezeichneten Proteinkomplex eingebettet. Die fünf Metall-Ionen sind durch Sauerstoffbrücken eng verbunden. Der kompakte Metall-Sauerstoff-Kern des hocheffizienten biologischen Katalysators ähnelt strukturell rein anorganischen MnCa-Oxiden. Die Wechselbeziehung zwischen den Bereichen Biochemie und anorganischen Oxiden ist daher auch für die Optimierung synthetischer Wasseroxidations-Katalysatoren von Interesse.

Privatdozentin Ivelina Zaharieva, Prof. Holger Dau und ihr Team von der FUB untersuchten dazu an den Beamlines KMC-3 und KMC-1 von BESSY II amorphe, hydratisierte Oxide. Holger Dau: „Wir können hier im Bereich mittlerer Röntgenenergien die Katalyse besonders gut unter realen Betriebsbedingungen verfolgen. Nach vielen Vorversuchen sind an KMC-3 sogar zeitaufgelöste Experimente gelungen. Nun wissen wir: In den wasserhaltigen Oxiden sind Strukturänderungen entscheidend, die innerhalb weniger Millisekunden ablaufen, genauso wie bei der Wasserspaltung in der biologischen Photosynthese.“

### Veränderung des Mn-Oxidations-Zustands

Die Forscher charakterisierten drei beispielhafte Mn-basierte Oxide, die alle amorphen Mineralien des sogenannten Birnessit-Typs ähneln. Werden diese einer Reihe von elektrochemischen Potentialen ausgesetzt, ähneln Zustand und strukturelle Veränderungen denen, wie sie im  $Mn_4CaO_5$ -Cluster von PSII im Reaktionszyklus der biologischen



Bei der biologischen Wasseroxidation (li.) unterstützt ein  $Mn_4CaO_5$ -Cluster die Photosynthese. Bei der künstlichen Wasseroxidation (re.) übernimmt eine mit Mn(Ca)-Oxid beschichtete Elektrode diese Funktion.

Wasseroxidation auftreten. Die Wissenschaftler fanden zudem heraus, dass die Fähigkeit, Veränderungen von Oxidationszustand und Struktur zu erreichen, ein entscheidender Faktor ist, um die katalytische Aktivität wasseroxidierender Oxide zu bestimmen. Ivelina Zaharieva erläutert, dass „das Anlegen einer elektrischen Spannung das Manganoxid transformiert. Die Schnelligkeit des Übergangs der Mangan-Ionen zwischen verschiedenen Oxidationszuständen ist entscheidend. Die Anwesenheit einer nichtkristallinen Struktur mit zahlreichen Mn(III)-Ionen ermöglicht schnelle Übergänge und so eine effiziente Wasserspaltung.“ Wasseroxidierende Mn(Ca)-Oxide zeigen sich also weniger als „biomimetische Gesteine“ denn als dynamische Materialien, die durch schnelle chemische Veränderungen des gesamten Oxidfilms – nicht nur an der Oberfläche – gekennzeichnet sind. Die dynamischen Redox-eigenschaften sind entscheidende Faktoren der katalytischen Aktivität. Diese neue Facette soll zu einem Schwerpunkt künftiger Untersuchungen werden – mit dem Ziel, durch Einblicke in die katalytischen Mechanismen die Entwicklung effizienter Katalysatoren zur Erzeugung nicht-fossiler Brennstoffe zu unterstützen. ve

Energy Environ. Sci., 2016, 9, 2433 (DOI: 10.1039/c6ee01222a): Water oxidation catalysis – role of redox and structural dynamics in biological photosynthesis and inorganic manganese oxides; I. Zaharieva et al.

## MEHR POWER BEI DER WASSERSPALTUNG

Ein israelisch-deutsches Forscherteam hat eine **graphitähnliche Kohlenstoffnitrid-Schicht** entwickelt und untersucht. Das robuste Material macht durch seine maßgeschneiderten Zusatzstoffe die elektrochemische Herstellung von Wasserstoff aus Wasser deutlich effizienter.

Eine Kernfrage der Energiefrage lautet: Was tun mit elektrischem Strom, der etwa an einem sonnenreichen Tag produziert, aber nicht gleich verbraucht wird? Eine elegante Lösung ist, das Sonnenlicht direkt zu nutzen, um Wasserstoff zu erzeugen. Denn der lässt sich einfach und beliebig lange speichern, als Brenn- oder Kraftstoff verwenden oder ins Erdgasnetz einspeisen. Das vielseitige Gas lässt sich durch die Spaltung von Wasser gewinnen. „Eine Möglichkeit dazu bietet eine photoelektrochemische Zelle. In dieser Zelle wird die Energie aus dem Sonnenlicht in chemische Energie umgewandelt“, sagt Prof. Dr. Kathrin Aziz-Lange, Leiterin der Helmholtz-Nachwuchsgruppe „Operando Characterization of Solar Fuel Materials“.



Solarzellen sind die bekannteste Form, um Sonnenlicht in Energie zu verwandeln. Am HZB haben Wissenschaftler eine effiziente Zelle für die elektrochemische Herstellung von Wasserstoff aus Sonnenlicht entwickelt.

Eine solche Zelle besteht im Prinzip aus zwei Elektroden, von denen eine auch als Photoabsorber dient. Hier wird die Energie aus dem Sonnenlicht genutzt, um bewegliche Ladungsträger zu erzeugen, die wiederum das Wasser spalten. Das Problem: Die bislang verfügbaren Materialien können nur einen geringen Anteil der solaren Energie in chemische Energie umwandeln. Oder das Wasser lässt die Werkstoffe korrodieren. Daher suchen die Forscher intensiv nach neuen, besser geeigneten Absorber-Materialien.

Auch Wissenschaftler aus Israel und Deutschland beteiligen sich an dieser Suche. Sie bauen auf graphitähnliches Kohlenstoffnitrid – eine Verbindung von Kohlenstoff und Stickstoff. „Für einen Einsatz in einer photoelektrochemischen Zelle

muss ein Material viele Anforderungen erfüllen“, erklärt Aziz-Lange. „Es sollte eine passende Bandlücke haben, um einen möglichst großen Anteil des Sonnenspektrums für die Energieumwandlung zu nutzen.“ Zudem braucht man eine günstige Lage der Energiebänder in der elektronischen Struktur des Materials, und eine gute elektrische Leitfähigkeit ist wichtig, um Energieverluste in der Zelle gering zu halten. Ebenfalls bedeutsam: Das Material sollte widerstandsfähig gegenüber Wasser sein, sich preisgünstig herstellen lassen und keine giftigen Bestandteile enthalten.

### Heißes Gas mit Zusatzstoffen

Um eine großflächige Produktion von Kohlenstoffnitrid-Photoabsorbern zu ermöglichen, benötigt man eine Abscheidetechnik, die homogene dünne Schichten erzeugen kann. Ein Team um den israelischen Chemiker Prof. Dr. Menny Shalom am Max-Planck-Institut für Kolloid- und Grenzflächenforschung in Potsdam nutzte hierfür ein Verfahren, bei dem das Material auf ein Substrat aufgedampft wird. Der Clou: Während des Aufdampfens fügten die Potsdamer besonders reaktionsfähige Moleküle – sogenannte Monomere – in das Gefüge des Kohlenstoffnitrids ein, um seine Eigenschaften als Photoabsorber zu verbessern.

Zusammen mit Kathrin Aziz-Lange und ihrem Team wiesen die Forscher um Shalom nach, dass das eindrucksvoll gelungen ist. So belegen röntgenspektroskopische Untersuchungen, dass die Monomere gleichförmig in der Schicht verteilt sind und so ihre Wirkung optimal entfalten können. Ergebnis: Das Material absorbiert einen breiten Spektralbereich des Sonnenlichts und nutzt vor allem kurzwelliges Licht sehr effizient. Dadurch wird etwa viermal so viel elektrischer Strom erzeugt wie von einem reinen Pulver. Eine Zelle zur Wasserspaltung schafft damit einen höheren Wirkungsgrad und ist zudem länger funktionsfähig. „Alle wichtigen Eigenschaften konnten wir deutlich verbessern“, bringt Kathrin Aziz-Lange den Erfolg auf den Punkt. *rb*

Adv. Energy Mater. 2016, 6, 1600263 (DOI: 10.1002/aenm.2016 00263): Efficiency Enhancement of Carbon Nitride Photoelectrochemical Cells via Tailored Monomers Design; J. Bian et. al.



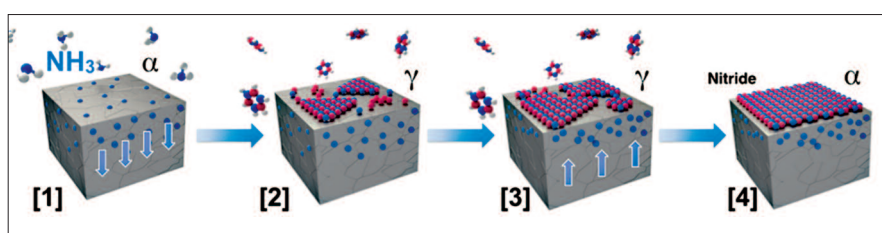
## EIN SUPERFLACHER KRISTALL FÜR DEN COMPUTER-CHIP DER ZUKUNFT

Prof. Dr. Stephan Hofmann von der Universität Cambridge hat mit Messungen an BESSY II gezeigt, dass durch die **chemische Gasphasen-Abscheidung** größere Schichten von Borazin mit einer Dicke von einem Atom herstellbar sind. Das ist ein wichtiger Schritt bei der Entwicklung von extrem kleinen und leistungsfähigen Speichereinheiten.

Wenn Elektronik-Ingenieure von der Zukunft träumen, denken sie meist an superflache Schichten, die gerade einmal ein Atom dick sind. Daraus lassen sich zum Beispiel „MRAM-Chips“ herstellen, die ohne zeitraubendes Hochfahren des Computers sofort nach dem Einschalten alle Daten parat haben. Oder Mikrochips, die ähnlich wie Nervennetze in Tieren gebaut sind und so energiesparende Schaltkreise ermöglichen könnten. Der Haken an dieser Wunder-Technologie: André Geim und Konstantin Novoselov haben zwar bereits 2010 den Nobelpreis für die Forschung an einem superflachen Material erhalten, aber sie zogen das nur aus Kohlenstoff bestehende Graphen schlicht mit einem Klebeband von einem Graphit-Block ab – ein Verfahren, das nicht gerade für eine Hightech-Anwendung taugt. Da greifen die Hersteller ultradünner Schichten lieber zur chemischen Gasphasen-Abscheidung, die CVD genannt wird, eine Abkürzung für den englischen Begriff „Chemical Vapour Deposition“. Bei diesem Verfahren wird eine chemische Verbindung verdampft und schlägt sich als dünne Feststoff-Schicht auf einer heißen Oberfläche nieder. Prof. Dr. Stephan Hofmann von der Universität Cambridge verdampft für diese CVD zum Beispiel die ringförmige Verbindung Borazin, die aus je drei Stickstoff- und Bor- sowie sechs Wasserstoff-Atomen besteht. Auf einer heißen Eisenoberfläche schlägt sich diese Substanz als hexagonales Bornitrid nieder. Dieses h-BN ähnelt in vielen Eigenschaften Graphen, das aus einer flachen Schicht aus aneinanderhängenden Sechsecken besteht, deren Ecken beim Graphen alle mit Kohlenstoff-Atomen besetzt sind. Beim h-BN wechseln sich dort dagegen Bor- und Stickstoff-Atome ab.

### Vorbehandlung verbessert das Verfahren

Trotz solcher Ähnlichkeiten aber gibt es einen wichtigen Unterschied: Während Graphen elektrischen Strom hervorragend leitet, tut h-BN das nicht. Materialien, die das können, suchen Elektronik-Ingenieure für die Schaltelemente der



Füllt Ammoniak Eisenlagen zunächst mit Stickstoff (blaue Kugeln) auf, bilden sich auf der Oberfläche anschließend perfekte Schichten aus h-BN (blaue und rote Kugeln), die nur ein Atom dick sind.

Zukunft. MRAM-Chips könnten im Prinzip aus zwei magnetischen Eisenlagen bestehen, die von einer h-BN-Schicht voneinander getrennt und elektrisch isoliert werden. In der Praxis lassen sich die ultradünnen Schichten aus diesem Material allerdings gar nicht so einfach herstellen. Vor allem nicht, wenn man größere Flächen oder einige Millionen integrierte Bauteile haben möchte, wie sie die Industrie benötigt. Viel besser funktioniert das Verfahren, wenn Hofmann das Eisen mit Ammoniak vorbehandelt. Diesen Vorgang beobachtet der Nanotechnologe mit den Röntgenstrahlen von BESSY II. Dabei nutzt der Forscher die Beamline, die Prof. Dr. Robert Schlögl vom Berliner Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft für seine Katalyse-Experimente bei hohen Temperaturen und niedrigem Druck vorbereitet hat. „Wie ein Schwamm saugt das Eisen die Stickstoff-Atome auf, die bei der Vorbehandlung vom Ammoniak abgegeben werden“, erklärt Hofmann die Ergebnisse aus dieser Röntgen-Analyse. Damit ist der Innenraum schon gut gefüllt, und bei der CVD bleibt den Stickstoff- und Bor-Atomen nur noch die Oberfläche des Eisens, auf der sie sich niederschlagen können. Stellt der Wissenschaftler die Bedingungen geschickt ein, bilden sie dort das begehrte h-BN in großen Schichten, die genau ein Atom dick sind. Und: Dieses h-BN ist neben Speicher-Techniken übrigens noch für etliche weitere Anwendungen der Elektronik der Zukunft im Gespräch. rk

Nano Letters, 2016, 16, 1250-1261 (DOI: 10.1021/acs.nanolett.5b04586): Controlling Catalyst Bulk Reservoir Effects for Monolayer Hexagonal Boron Nitride CVD; S. Caneva et. al.

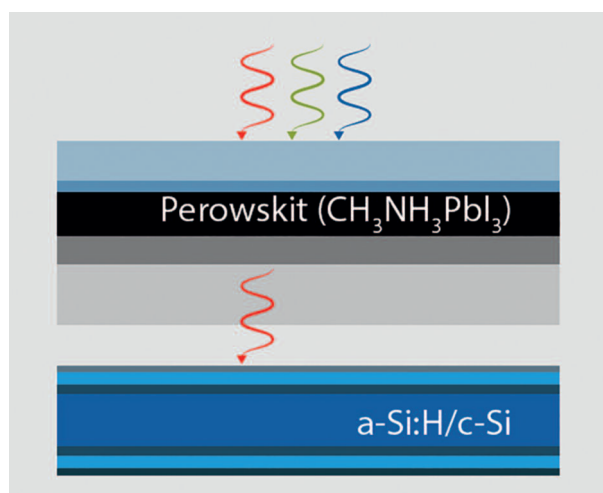
## MIT DER TANDEMSTRUKTUR ZU MEHR EFFIZIENZ

Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern des Clarendon Laboratory an der Universität Oxford sowie des HZB-Instituts für Silizium-Photovoltaik ist es gelungen, ein hochkristallines und **photo-stabiles Halogenid-Material für Perowskit-Solarzellen** zu entwickeln. Dadurch können sogenannte Tandem-Solarzellen noch höhere Wirkungsgrade erreichen.

Der Fokus in der Forschung an hocheffizienten Solarzellen richtet sich derzeit auf das Konzept der Tandem-Solarzelle. Je nach Material oder Bauweise können diese Zellen unterschiedliche Wellenlängen des einfallenden Sonnenlichts in elektrische Energie umwandeln. Beim Tandemkonzept werden verschiedene Zellentypen in einer Art Sandwich-Prinzip übereinander angeordnet, sodass die Gesamteffizienz des Tandems optimiert wird. Dazu haben die Wissenschaftler um Prof. Dr. Bernd Rech, Leiter des Instituts Silizium-Photovoltaik, und Henry Snaith, Leiter der Photovoltaic and Optoelectronic Device Group an der University of Oxford, verschiedenartige Kompletzzellen mechanisch aufeinander montiert. Bernd Rech erläutert: „Wir glauben, dass die Kombination der etablierten Silizium-Technologie mit Perowskit-Zellen zu einem Tandem mittel- bis langfristig die heute genutzten Zellen mit nur einer Bandlücke ablösen wird. Solche Tandems ermöglichen signifikante Steigerungen des Wirkungsgrades bei geringen zusätzlichen Kosten, weil die Perowskit-Zellen sehr kostengünstig hergestellt werden können.“

### Das Material der Wahl: Metallhalogenid-Perowskit

Die Forscher knüpften an frühere Ergebnisse an, wonach durch Veränderungen der Halogenidzusammensetzung eine Perowskit-Zelle entwickelt werden kann, die über eine optimale optische Bandlücke von  $\sim 1,75$  Elektronenvolt (eV) verfügt und die daher besonders effizient Sonnenlicht in Strom umwandelt. Bislang waren solche Materialien jedoch vergleichsweise instabil. Dem englisch-deutschen Forscherteam ist es gelungen, ein hochkristallines und photo-stabiles Material zu entwickeln, das über eine optische Bandlücke von  $\sim 1,74$  eV verfügt. Es besteht aus Blei, dem organischen Molekül Formamidinium ( $\text{HC}(\text{NH}_2)_2$ ), den Halogenen Iod und Brom, sowie Cäsium (Summenformel  $([\text{HC}(\text{NH}_2)_2]_{1-0,83}\text{Cs}_{0,17}\text{Pb}(\text{I}_{0,6}\text{Br}_{0,4})_3)$ ). Die damit hergestellten Perowskit-Zellen erreichten eine Leistungsumwandlungseffizienz von mehr als 17 Prozent auf kleinen Flächen. Werden sie als Tandemzellen mit einer Siliziumzelle kombiniert, so lässt sich eine Gesamteffizienz erreichen, die



Schema des Aufbaus einer Tandem-Solarzelle aus Perowskit (oben) und Silizium.

bei knapp 20 Prozent liegt. Der maximal erreichbare Wirkungsgrad eines solchen Tandems lässt sich mit realistischen Annahmen zu möglichen Verbesserungen auf circa 30 Prozent schätzen.

### Ein Bündel an Herausforderungen

Für Metallhalogenid-Perowskit-basierte Photovoltaik-Zellen werden meist organisch-anorganische Trihalogenid-Perowskite verwendet. Diese weisen jedoch grundlegende Probleme bei der Abstimmung der Bandlücke und der Langzeitstabilität auf. Sie erfüllen damit nicht die internationalen Standards für kommerziell hergestellte Solarzellen. Durch eine veränderte Materialzusammensetzung konnte das Forscherteam den Phaseninstabilitätsbereich zwischen Iodid und Brom vollständig vermeiden, so wurde das Formadiniumkation teilweise durch Cäsium ersetzt. Formadinium-Cäsium-basierte Perowskite scheinen somit die beste strukturelle und thermische Stabilität zu gewährleisten. Das Material mit einer optimalen Bandlücke ist zudem in der Lage, eine höhere Leerlaufspannung zu erzeugen. „Beim Betrieb als Einzelzelle ist so allerdings keine höhere Effizienz möglich:

Bei einer größeren Bandlücke werden nämlich in der Zelle weniger Photonen in Photostrom umgewandelt, und die Effizienz hängt von beiden Parametern, Strom und Spannung, ab“, erklärt Lars Korte vom HZB. „In der Tandem-Zelle stellt dies jedoch kein Problem mehr dar, denn dort werden diese im Perowskit nicht genutzten Photonen an die Silizium-Zelle ‚durchgereicht‘ und tragen zu deren Photostrom bei. Bei passend gewählten Bandlücken steigt so die Gesamteffizienz des Tandems, weil Thermalisierungsverluste verringert werden.“ Die Strom-Spannungs-Kennlinie der besten Perowskit-Solarzelle lieferte unter Standard-Testbedingungen eine Leerlaufspannung von 1,2 Volt und einen Energiewandlungs-Wirkungsgrad von 17,1 Prozent. Die potentielle Verwendbarkeit der neuen Perowskit-Komposition in einer Tandemarchitektur demonstrierten die Forscher durch semitransparente Perowskit-Solarzellen, die zusammen mit Silizium-Heterojunction-Zellen eine Gesamt-Effizienz – sie entspricht der Summe der Einzel-Zelleffizienzen – von 19,8 Prozent erreichten. Die spektral aufgelösten externen Quanteneffizienzen der beiden Einzelzellen dieses Tandems zeigen allerdings noch

deutliche optische Verluste, die durch weitere Bauteil-Optimierungen reduziert werden müssen.

#### Die Tandem-Solarzelle hat Zukunft

Bernd Rech fasst zusammen, dass die Tandemzelle „durch die kontinuierliche Abstimmbarkeit der Perowskit-Bandlücke optimal auf das Sonnenspektrum abgestimmt werden kann.“ Ein Wirkungsgrad von bis zu 30 Prozent ist zu erwarten, wenn das System weiter optimiert wird. Die Abstimmbarkeit über das gesamte sichtbare Spektrum wird sich zudem generell positiv auf die Farb-abstimmbarkeit und Optimierung von Perowskiten für lichtemittierende Anwendungen (LED) auswirken. Der Nutzen der Forschungen reicht damit weit über das Gebiet der reinen Photovoltaik hinaus. ve

Science, Vol. 351, Issue 6269, pp 151-155 (DOI: 10.1126/science.aad5845): A mixed-cation lead mixed-halide perovskite absorber for tandem solar cells; D. P. McMeekin, G. Sadoughi, W. Rehman, G. E. Eperon, M. Saliba, M. T. Hörantner, A. Haghighirad, N. Sakai, L. Korte, B. Rech, M. B. Johnston, L. M. Herz, and Henry J. Snaith

## PLATINKATALYSATOR FÜR DAS WASSERSTOFFAUTO

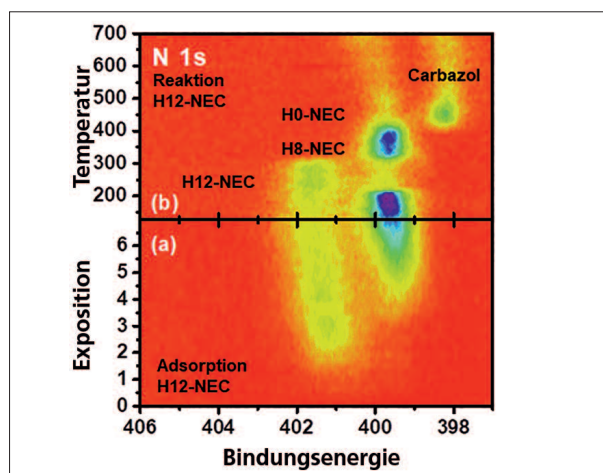
Ein Forschungsteam der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg sowie des Helmholtz-Instituts Erlangen-Nürnberg für Erneuerbare Energien hat an BESSY II die Vorgänge in einem Platin-Katalysator untersucht. Mit ihm kann Wasserstoff in **flüssigen Speichermaterialien** gebunden werden. Dies könnte den Weg für den effizienten Einsatz von Wasserstoff in Fahrzeugen ebnen.

**W**asserstoff gilt als der vielversprechendste Energieträger für Mobilität, der direkt aus Sonnen- oder Windstrom hergestellt werden kann und der ähnliche viele Vorteile wie Benzin, Diesel und Kerosin bietet. Der mittels Elektrolyse hergestellte Wasserstoff ist nicht nur für die chemische Industrie ein wichtiger Rohstoff mit einem Jahresumsatz von 60 Millionen Tonnen, sondern auch ein begehrter Energieträger. Er kann mit dem Sauerstoff der Luft in Brennstoffzellen wieder zu Wasser verbunden werden und liefert dabei elektrischen Strom, der bei Flaute fehlende Windenergie ersetzt oder einen Elektromotor im Auto antreiben kann. Obendrein speichert ein Kilogramm Wasserstoff auch noch ähnlich viel Energie wie drei Kilogramm Benzin oder Diesel. Leider gilt diese sehr hohe

Energiedichte nur für das Gewicht, nicht aber für das Volumen, denn für ein Kilogramm Wasserstoff bräuhete man auf Meereshöhe einen mehr als 11.000 Liter fassenden Tank. Da ein Auto kaum einen Fesselballon als Tank mit sich schleppen kann, scheidet Wasserstoff in dieser Form für den Verkehr völlig aus. Zwar kann man das Gas bei extrem tiefen Temperaturen von weniger als minus 250 Grad Celsius verflüssigen oder bei sehr hohem Druck auf akzeptable Größen komprimieren. Nur wiegt ein Tank samt Kälte-Isolierung oder Druckbehälter immer noch ein Mehrfaches eines Benzintanks. Und er hat obendrein den Nachteil, dass flüssiger Wasserstoff langsam aber stetig verdampft oder dass Druckgas mit der Zeit auch durch die dichteste Hülle entweicht.

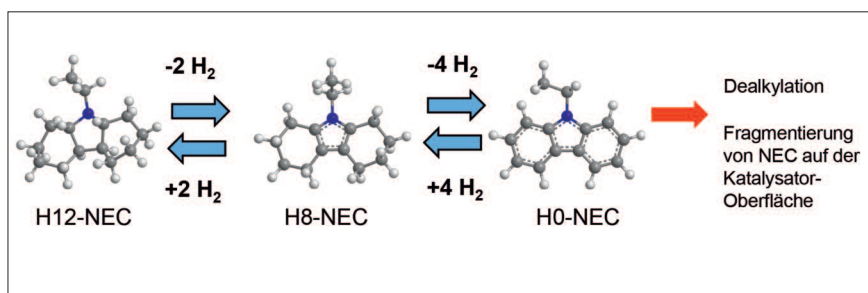
### Flüssige Wasserstoffspeicher

Solche Nachteile vermeiden Flüssigkeiten wie N-Ethyl-Carbazol (NEC) oder Di-Benzyl-toluol (DBT). Mit Hilfe eines Katalysators saugen beide Stoffe Wasserstoff bei niedrigen Temperaturen regelrecht auf und werden so zu einem Energiespeicher, der als ölige Flüssigkeit einem Diesel-Kraftstoff stark ähnelt und sich auch ähnlich verhält. Solche Substanzen nennen die Forscher nach dem englischen Begriff „Liquid Organic Hydrogen Carrier“, kurz LOHC. „Wir können also für die Wasserstoff-Speicherung in LOHC-Systemen die vorhandene Infrastruktur wie Tankstellen oder auch Tankfahrzeuge weiter nutzen“, erklärt Prof. Dr. Peter Wasserscheid. Der Verfahrenstechniker will als Gründungsdirektor des Helmholtz-Instituts Erlangen-Nürnberg für Erneuerbare Energien (HI ERN) die Aktivitäten des Forschungszentrums Jülich, des HZB und der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg gerade auf diesem Gebiet bündeln. Mit Wasserstoff beladen kann man in Zukunft NEC oder DBT in den Tank eines Brennstoffzellen-Autos füllen, das dann den Wasserstoff wieder aus der Flüssigkeit holt.



Diese farbcodierte Darstellung zeigt, wie Wasserstoff-beladenes NEC zuerst vier Wasserstoff-Atome abgibt, danach acht weitere und schließlich durch den Verlust der Seitenkette zerstört wird.

Das wiederum passiert an einem Platin-Katalysator und verbraucht ein wenig Energie. In der Gesamtbilanz aber schneidet dieser flüssige Wasserstoffträger verglichen mit dem direkten Verflüssigen von Wasserstoff oder seiner Aufbewahrung unter hohem Druck und den dabei auftretenden Verlusten deutlich besser ab. „Der Platin-Katalysator ist derzeit allerdings ein gewisser Flaschenhals für eine Anwendung in Autos“, erklärt der Physikochemiker Dr. Christian Papp von der Universität Erlangen-Nürnberg. Zwar geben NEC und DBT den gebundenen Wasserstoff



In zwei Schritten gibt der NEC-Speicher zunächst vier und dann weitere acht Wasserstoff-Atome ab, bei noch höheren Temperaturen zerstört das Abbrechen der Seitenkette den flüssigen Wasserstoff-Träger.

mit diesem Katalysator sehr gut wieder ab, nur müsste das Bauteil noch leichter werden und weniger Platz benötigen. Solche Verbesserungen wiederum klappen umso leichter, je besser die Forscher verstehen, wie der Katalysator bei der Abgabe des Wasserstoffs hilft.

Daher packt Christian Papp immer wieder seine Versuchsanlage in einen LKW und transportiert sie von seinem Labor in Erlangen zu einem Open Port am Berliner Synchrotron BESSY II. Dort liefert der Elektronenstrahl eine so hohe Photonendichte, dass der Forscher die Vorgänge auf dem einen Zentimeter langen und breiten, sowie drei Millimeter dicken Platin-Katalysator in wenigen Sekunden sehr detailliert beobachten kann. „Mit BESSY II können wir sozusagen Live-Bilder von der Oberfläche des Katalysators in kurzen Abständen aufnehmen“, erklärt der Forscher.

### Weg der Wasserstoffatome verfolgt

Offensichtlich gibt mit Wasserstoff beladenes NEC diese Substanz in zwei deutlich voneinander abgegrenzten Schritten ab, wie die BESSY II-Daten zeigen: Das NEC-Molekül besteht aus zwei Ringen aus jeweils sechs Kohlenstoff-Atomen, von denen jeweils zwei Kohlenstoffe mit einem zusätzlichen Stickstoff-Atom einen Fünf-Ring bilden, der die beiden Sechs-Ringe aneinander „schweißt“. Im ersten Schritt gibt das mit Wasserstoff beladene NEC vier Wasserstoff-Atome von diesem Fünf-Ring in der Mitte ab. Höhere Temperaturen bringen danach einen weiteren Energieschub, der ausreicht, um insgesamt acht weitere Wasserstoff-Atome von den beiden Sechs-Ringen zu lösen. Noch höhere Temperaturen spalten dann eine Seitenkette vom NEC ab und zerstören so den flüssigen Energieträger, weil er dabei schlagartig fest wird. Mithilfe dieser detaillierten Bilder können die Forscher den Katalysator weiter verbessern und ihn für den Einsatz in Kraftfahrzeugen optimieren.

rk

Acc. Chem. Res. 2017, 50, 74–85 (DOI: 10.1021/acs.accounts.6b00474): Liquid Organic Hydrogen Carriers (LOHCs): Toward a Hydrogen-free Hydrogen Economy; P. Preuster, C. Papp and P. Wasserscheid

## SELBSTTHEILUNG IM WELTALL

Ein deutsch-italienisches Forscherteam hat am HZB organisch-anorganische **Solarzellen aus Perowskit** unter Weltraum-ähnlichen Bedingungen untersucht. Sie sind sehr robust gegen Strahlenschäden, und entstandene Defekte heilen sogar eigenständig aus. Das macht sie zu aussichtsreichen Kandidaten für den Einsatz auf Raumfahrtmissionen.

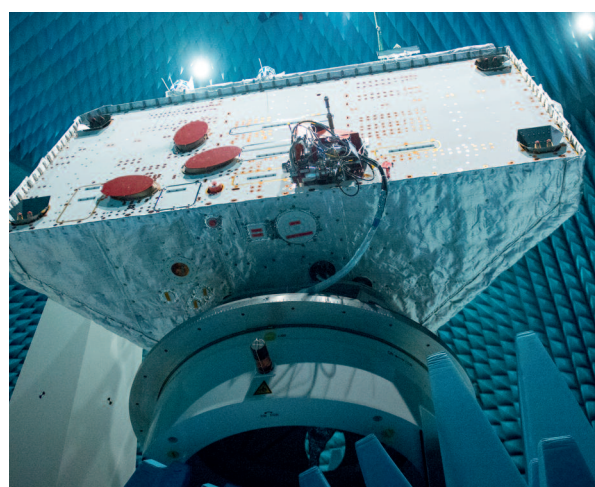
**W**eit oben im Weltraum herrschen raue Bedingungen. Denen sind nicht nur Astronauten ausgesetzt, sondern auch Solarzellen, die Satelliten und Raumsonden mit elektrischem Strom aus Sonnenlicht versorgen. Vor allem die energiereiche kosmische Strahlung, die unter anderem aus Protonen und Helium-Atomkernen – sogenannten Alpha-Teilchen – besteht, zehrt an den Zellen. Messungen zeigen, dass teils mehrere Billionen Partikel pro Tag auf jeden Quadratmillimeter der Zellenoberfläche prasseln. Die Folge sind Schäden im Material, die die Effizienz bei der solaren Stromerzeugung verringern.

### Protonenbeschleuniger als künstlicher Kosmos

„Bislang kommen auf Weltraumflügen meist Solarzellen aus Silizium oder Tandem-Solarzellen aus Gallium-Indiumphosphid, Gallium-Indiumarsenid und Germanium zum Einsatz“, sagt Felix Lang, Forscher am HZB-Institut für Silizium-Photovoltaik. Diese Tandem-Solarzellen zeichnen sich durch einen hohen Wirkungsgrad aus, allerdings sind sie besonders empfindlich gegenüber der kosmischen Strahlung: „Bei manchen Satellitenmissionen hatte sich die Effizienz der Solarzellen nach einem Monat bereits um etwa zehn Prozent verringert“, berichtet Lang. Um andere Solarzellen-Materialien wie CIGS – das Kürzel steht für Kupfer-Indium-Galliumdiselenid – machen die Raumfahrt-Ingenieure bisher einen Bogen. Denn CIGS ist zwar widerstandsfähiger gegen kosmische Strahlung als andere Halbleiter, hat aber einen vergleichsweise niedrigen Wirkungsgrad.

Die Lösung könnten bestimmte Perowskit-Kristalle liefern, fand Lang zusammen mit Forscherkollegen am HZB und der italienischen Universität Salerno heraus. Die Wissenschaftler nutzten einen Protonenbeschleuniger am Lise-Meitner-Campus in Berlin-Wannsee, der häufig auch für die Behandlung von Tumorpatienten genutzt wird, um den Einfluss der energiegeladenen Wasserstoff-Kerne auf Perowskit-Zellen zu untersuchen. Die Strahlung in der Anlage ähnelt dem energiegeladenen Partikelstrom aus dem Kosmos.

Die Forscher bestrahlten eine Solarzelle aus Perowskit zehn Tage lang mit Protonen unterschiedlicher Intensität. Dabei verfolgten sie die Veränderung von charakteristischen physikalischen Merkmalen, die auf die Effizienz der Zelle



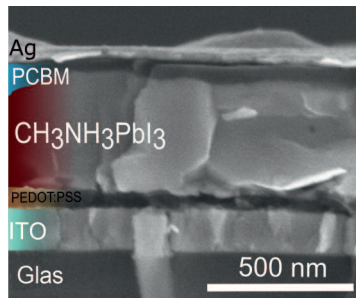
Die Raumsonde BepiColombo im Europäischen Weltraumforschungs- und Technologiezentrum (ESTEC) im niederländischen Noordwijk soll 2018 in Richtung Merkur starten. Die sichere Stromversorgung im Weltall stellt höchste Anforderungen an die in der Raumfahrt eingesetzten Solarzellen.

schließen lassen. Das Material der Testzelle bestand aus einer komplexen chemischen Verbindung von Stickstoff, Blei, Iod und Methylgruppen – ein sogenannter hybrider Perowskit. Um Vergleichswerte zu gewinnen, unterzogen die Forscher auch eine herkömmliche Solarzelle aus Silizium derselben Degradation. „Da durch den Protonenbeschuss radioaktive Elemente entstehen, mussten wir ein autonom arbeitendes Messsystem im Beschleunigerkomplex aufbauen – und die Messungen mit einer Kamera beobachten“, berichtet Lang.

### Selbstheilungskräfte beobachtet

Das Resultat: „Der Verlust an Effizienz im Perowskit ist deutlich geringer als in der Referenzprobe aus Silizium“, sagt Lang. Zudem widersteht Perowskit auch Strahlendosen, die so hoch sind, dass eine Silizium-Solarzelle vollständig ihre Funktionsfähigkeit verliert. Mehr noch: Nach Abschalten der Strahlung verbesserte sich die Effizienz der dem Protonenbeschuss ausgesetzten Perowskit-Solarzelle im Verlauf von einigen Tagen wieder. Die erzeugten Defekte, die vermutlich

Rasterelektronenmikroskop-Aufnahme einer Solarzelle mit dünner Perowskit-Schicht in der Mitte. Ihr Herzstück ist eine rund 400 Nanometer dünne Schicht aus dem Material  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ .



durch das Aufbrechen von chemischen Bindungen zwischen Kohlenstoff- oder Stickstoff- und Wasserstoff-Atomen entstehen, „verheilen“ also allmählich.

„Das macht die Solarzellen aus Perowskit ideal geeignet für eine Verwendung auf Satelliten und Raumfahrzeugen“, meint Lang. Denn sie sind nicht nur strahlungsresistent, sondern haben zudem einen hohen Wirkungsgrad von teils

mehr als 20 Prozent. Langs Idee: Eine dünne Schicht aus einem geeigneten Perowskit ließe sich mit CIGS kombinieren. Mit einer solchen Tandem-Solarzelle lässt sich das Spektrum des Sonnenlichts besonders effektiv zur Stromerzeugung nutzen. Doch die robusten Zellen könnten künftig nicht nur im Weltraum Verwendung finden. Lang kann sich auch Anwendungen auf der Erde dafür vorstellen: etwa als robuste Sensoren für Strahlung oder Licht – oder, um in den radioaktiv verstrahlten Gebieten rund um Tschernobyl oder Fukushima, die auf absehbare Zeit nicht mehr bewohnt werden können, elektrischen Strom durch großflächige Solarparks zu erzeugen. *rb*

Adv. Mater. 2016, 28, 8726–8731 (DOI: 10.1002/adma.201603326): Radiation Hardness and Self-Healing of Perovskite Solar Cells; F. Lang, N. H. Nickel, J. Bundesmann, S. Seidel, A. Denker, S. Albrecht, V. V. Brus, J. Rappich, B. Rech, G. Landi, and H. C. Neitzert

## FORTSCHRITTE IM KAMPF GEGEN DAS ZIKA-VIRUS

Forschende von der Universität Lübeck haben mit Messungen an BESSY II erstmals die Struktur eines zentralen Proteins des Erregers des **Zika-Virus** untersuchen können. Das ist ein wichtiger erster Schritt auf dem Weg zu einem wirksamen Medikament gegen das gefährliche Virus.

**W**eil das Zika-Virus offensichtlich schwere Missbildungen des Gehirns von Ungeborenen verursacht, erklärte die Weltgesundheitsorganisation WHO am 1. Februar 2016 den „Öffentlichen Gesundheitsnotstand internationalen Ausmaßes“. Zu diesem Zeitpunkt suchten Wissenschaftler in aller Welt bereits fieberhaft nach einem Wirkstoff, der ein zentrales Protein des Erregers außer Gefecht setzt, ohne das Zika-Viren sich nicht vermehren können.

Bei diesem Wettlauf der weltweiten Spitzenforschung hatten schließlich Prof. Dr. Rolf Hilgenfeld von der Universität Lübeck und seine Kollegen die Nase vorn. Knapp zwei Monate nach der Erklärung des Gesundheitsnotstandes der WHO lieferten Messungen am Elektronenspeicherring BESSY II Ende März 2016 die ersten Daten für eine grobe Struktur des lahmgelegten Proteins. Weitere Details der Struktur stellten die Forscher schließlich nach Fein-Analysen am Deutschen Elektronen-Synchrotron DESY am 7. Juli 2016 der Weltöffentlichkeit vor. So öffneten sie den Weg

zur Entwicklung von Medikamenten gegen die heimtückische Infektionskrankheit.

Die Forscher setzen aus einem triftigen Grund auf solche Wirkstoffe gegen das Zika-Virus: Ein guter Impfstoff könnte eine Infektion zwar verhindern, scheint aber in weiter Ferne zu liegen. Also warten die Ärzte auf Medikamente, die zumindest den Erreger lahmlegen. Um diese zu entwickeln, müssen Forscher wie Rolf Hilgenfeld zunächst einmal den Gegner kennenlernen, um mögliche Angriffspunkte auszumachen.

### Reproduktion erfolgreich gestoppt

Zika-Viren gehören zu den Flavi-Viren und sind daher mit den Erregern von Gelb-, Dengue- und West-Nil-Fieber, aber auch mit dem Auslöser der in Mitteleuropa vorkommenden Frühsommer-Meningoenzephalitis FSME verwandt. Stechmücken und Zecken übertragen diese Viren auf Menschen und Tiere. Während das Erbmaterial praktisch aller Lebewesen auf der Erde aus zwei Nukleinsäure-Strängen besteht,

die sich umeinander wickeln und mit „DNA“ abgekürzt werden, ist das Erbmateriale der Flavi-Viren ein einzelner Nukleinsäure-Strang, den Molekularbiologen als „RNA“ bezeichnen.

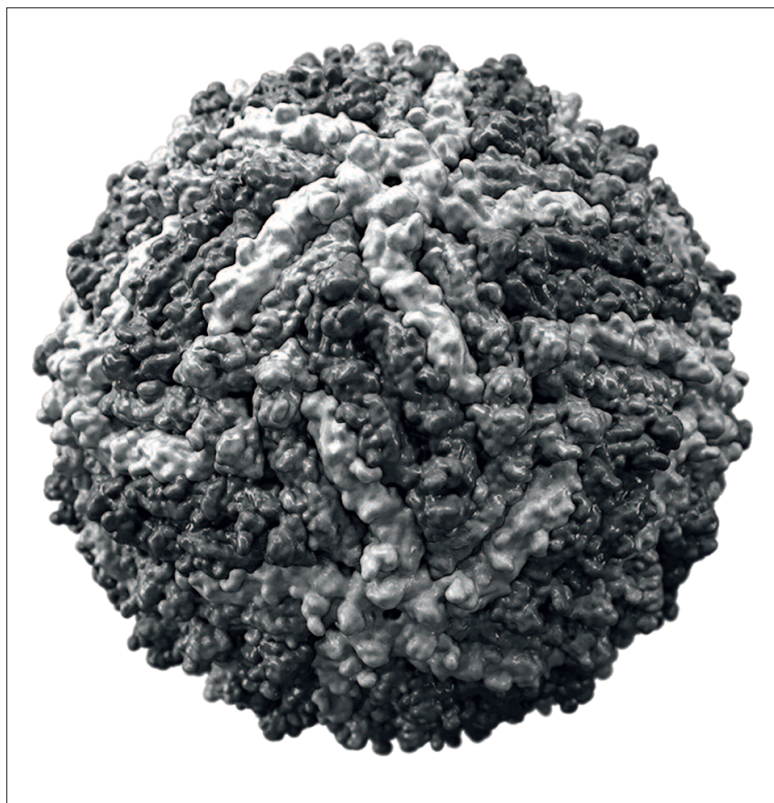
Stellen Tiere, Pflanzen und Bakterien Proteine und damit die zentralen Bestandteile ihrer Zellen her, produzieren sie von ihrer DNA zunächst eine Abschrift in Form eines einzelnen RNA-Stranges, nach dessen Vorlage dann die Proteine hergestellt werden. Flavi-Viren können sich diese Abschrift sparen, weil sie eben diese RNA gleich als Erbgut nutzen. Sobald ein Zika-Virus eine Zelle infiziert hat, beginnt die Zellmaschinerie nach dieser Vorlage ein extrem großes Protein zu produzieren. Anschließend zerlegt ein vom Virus mitgebrachtes Enzym diesen Giganten in die zehn Proteine, aus denen das Zika-Virus besteht.

Schaltet ein Wirkstoff dieses „Protease“ genannte Virus-Enzym aus, wird das Riesen-Protein nicht mehr zerschnitten. So entstehen keine neuen Viren mehr und die Infektion ist gestoppt. Zumindest in der Theorie. In der Praxis hat Prof. Dr. Christian Klein von der Universität Heidelberg mit einer Boronsäure zwar einen solchen Wirkstoff entwickelt, der die Protease zuverlässig ausschaltet. Als Medikament kann diese Substanz aber nicht eingesetzt werden, weil sie im Körper nicht bis zur Infektion vordringt.

#### Analyse als Basis für einen Wirkstoff

Trotzdem lohnt eine Analyse dieser Blockade der Zika-Virus-Protease, weil die Forscher auf dieser Basis einen Wirkstoff entwickeln können, der sich als Medikament eignet, indem er das Virus-Enzym in ähnlicher Weise ausschalten kann. Rolf Hilgenfeld und seine Mitarbeiter stellten daher im Bakterium *Escherichia coli* die Zika-Protease her, um sie genauer zu untersuchen. Überrascht stellten die Forscher fest, dass dieses Enzym erheblich schneller und effektiver arbeitet als seine Verwandtschaft von Dengue-, Gelbfieber- und West-Nil-Viren.

Dann stellten die Wissenschaftler aus dem mit Boronsäure blockierten Zika-Virus-Enzym Kristalle her, die für eine Röntgenstruktur-Analyse benötigt werden. Normalerweise muss man solche Experimente lange im Voraus anmelden. Bei einem so bedeutenden und dringlichen Thema aber setzte Dr. Manfred Weiss, Leiter der HZB-Forschergruppe Makromolekulare Kristallographie (NP-GMX), alle Hebel in Bewegung und verschaffte Rolf Hilgenfeld kurzfristig die Möglichkeit, an BESSY II die Röntgenstruktur der Kristalle zu bestimmen. Zum ersten Mal erhielten die Forscher Ende



3D-Rekonstruktion des Zika-Virus. Es befällt vor allem Zellen der Haut und neuronale Stammzellen. Aufgrund der Infektion neuronaler embryonaler Stammzellen entstehen vermutlich die Schäden bei der neuronalen Entwicklung von Embryonen.

März 2016 die Daten für eine grobe Struktur des Komplexes aus Zika-Virus-Protease und Boronsäure. Darin konnten sie Strukturen mit einer Größe von 0,4 Nanometern erkennen, die also nicht einmal den millionstel Teil eines Millimeters groß sind.

Fieberhaft arbeiteten sie daran, noch bessere Kristalle herzustellen, die sie dann im April 2016 am ebenfalls zur Helmholtz-Gemeinschaft gehörenden DESY in Hamburg mit einer höheren Auflösung von 0,27 Nanometern analysierten. Demnach blockiert die Boronsäure eine Serin-Aminosäure, die genau an der Stelle der Zika-Virus-Protease sitzt, die das Riesen-Protein in die zehn Zika-Virus-Proteine zerlegt. Mit diesem Wissen sucht Rolf Hilgenfeld inzwischen Substanzen, die an der gleichen Stelle die Protease blockieren und die sich – anders als die Boronsäure – als Medikament eignen. Hat er Erfolg, könnte das Zika-Virus schon bald seinen Schrecken verlieren.

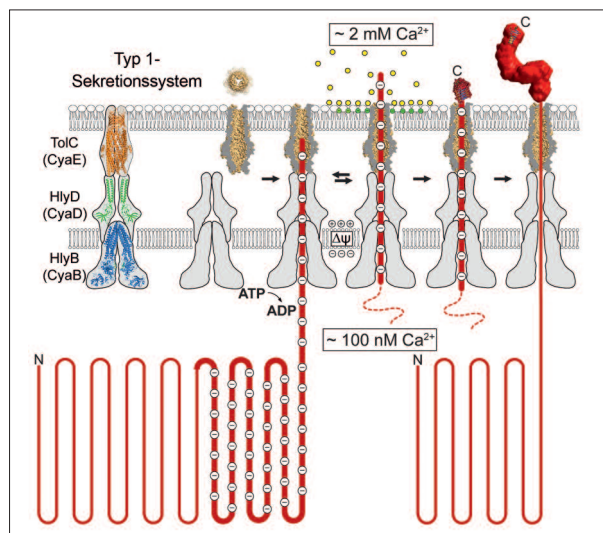
rk

Science, 353, pp. 503-505, 2016 (DOI: 10.1126/science.aag2419): Crystal structure of Zika virus NS2B-NS3 protease in complex with a boronate inhibitor; J. Lei, G. Hansen, C. Nitsche, C. D. Klein, L. Zhang, and R. Hilgenfeld

## SCHWÄCHEN STATT TÖTEN

Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern des Instituts für Mikrobiologie der Akademie der Wissenschaften in Prag ist es durch Untersuchungen an BESSY II gelungen, Vorgänge im **Keuchhusten-Erreger *Bordetella pertussis*** zu beobachten. Ihre Erkenntnisse eröffnen einen neuen Ansatz zur Entwicklung wirksamer Medikamente.

Die Medizin kämpft mit dem Problem, dass immer mehr Mikroorganismen gegen Antibiotika resistent sind. Den Grund für diese Entwicklung erklärt Prof. Dr. Peter Sebo vom Institut für Mikrobiologie der Akademie der Wissenschaften der Tschechischen Republik in Prag: „Antibiotika töten Bakterien. Daher ist der Druck auf diese Organismen sehr hoch, solche Wirkstoffe zu entschärfen.“ Zwar wirken neu entwickelte Antibiotika in den ersten Jahren hervorragend, aber dann tauchen Mikroorganismen auf, die eine solche Behandlung überleben und sich als resistente Variante durchsetzen. Deshalb sterben heute jährlich viele Tausend Menschen durch antibiotikaresistente Keime.



Einblick in den Keuchhusten-Erreger: Zur Abwehr von Fresszellen schleust er den Giftstoff Adenylatcyclase aus der Zelle – mit dem sogenannten C-Ende voran, das mit Hilfe von Kalzium gefaltet wird. Neue Medikamente könnten durch das Bremsen dieses Vorgangs den Keuchhusten-Erreger wirksam lahmlegen.

Viel besser wären die Chancen, wenn Wirkstoffe einen geringeren Druck auf die Krankheitserreger ausüben würden. Das wiederum könnten Medikamente erreichen, die solche Mikroorganismen nicht direkt töten, sondern nur ihre Fähigkeit schwächen, Krankheiten auszulösen. Dazu wiederum muss

man wissen, wie eine Infektion abläuft. Genau daran arbeiten Peter Sebo und seine Mitarbeiter beim Keuchhusten-Erreger *Bordetella pertussis*. Dringt dieses Bakterium in die Atemwege ein, versucht das Immunsystem des Körpers, den Eindringling mit Hilfe von sogenannten Fresszellen zu bekämpfen. Der Keuchhusten-Erreger aber wehrt sich gegen diesen Angriff mit dem Giftstoff Adenylatcyclase. Dieses Protein dringt in die Fresszellen ein, um sie auszuschalten.

### Adenylatcyclase am Falten gehindert

Peter Sebo interessiert sich daher für die Adenylatcyclase und möchte wissen, wie das Bakterium dieses sehr große Biomolekül durch seine Außenhülle transportiert. Sein Mitarbeiter Ladislav Bumba und weitere Kollegen fanden heraus, dass im Gewebe normalerweise reichlich vorhandenes Kalzium dabei eine entscheidende Rolle spielt. Röntgenstrukturanalysen am BESSY II-Synchrotron enthüllten schließlich wichtige Vorgänge dabei: Die Adenylatcyclase ist wie andere Proteine auch eine lange Kette aus verschiedenen Aminosäuren. Diese Kette wird mit dem von Biochemikern „C-Ende“ genannten Teil voraus ausgeschleust. Kalzium beschleunigt diesen Vorgang nicht nur enorm, sondern hilft auch maßgeblich dabei, die langgestreckte Kette der Adenylatcyclase zu falten. So erhält das C-Ende des Proteins seine endgültige Form und ist jetzt deutlich dicker als die ausgeschleuste Kette. Dadurch ist der Adenylatcyclase der Weg zurück ins Bakterium versperrt, und sie kann auch nur in dieser Form in die Fresszellen eindringen.

Tauschen die Forscher nur zwei Aminosäure-Bausteine in der Nähe des C-Endes aus, klappt dieses Falten nicht mehr richtig und die Adenylatcyclase schaltet die Fresszellen schlechter aus: „Mit dieser Veränderung ist die zehnfache Bakterienmenge erforderlich, damit es zu einer Keuchhusten-Infektion kommt“, erklärt Peter Sebo. Mit dieser Erkenntnis kann die Suche nach Wirkstoffen beginnen, die das Falten verhindern und so die Infektionskraft der Bakterien schwächen. rk

Molecular Cell, 62, pp. 47-62, 2016 (DOI: 10.1016/j.molcel.2016.03.018): Calcium-Driven Folding of RTX Domain beta-Rolls Ratchets Translocation of RTX Proteins through Type I Secretion Ducts; L. Bumba et. al.



## WAS ZÄHNE FESTER MACHT ALS JEDE FÜLLUNG

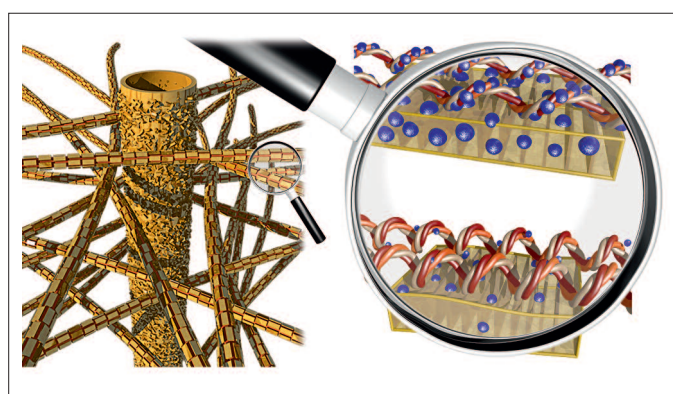
Forschende der Charité-Universitätsmedizin Berlin haben mit Messungen an BESSY II die **Nanostruktur von Zahnbein** untersucht. Dabei fanden sie die Ursache für dessen ungewöhnliche Härte. Ihre Erkenntnisse liefern Hinweise, wie man Füllungen verbessern kann.

**G**anze 5000 Mal und mehr beißt der Mensch an einem Tag zu. Gesunde Zähne brechen dabei erstaunlich selten und sie halten beim Kauen starkem Druck stand. Das liegt an ihrem Aufbau. Ein Zahn besteht aus dem Zahnbein, auch Dentin genannt, welches von Zahnschmelz umhüllt ist. Das Geheimnis steckt im Detail. Das Zahnbein ist eine knochenähnliche Substanz, bestehend aus kleinsten mineralischen Nanopartikeln, Kollagen und Wasser. Während der Zahnschmelz vor allem aus dem Mineral cHAP gebildet wird, ist das Dentin ein komplexes Nanokomposit: In organische Kollagen-, also Eiweißfasern, sind anorganische Nanopartikel aus cHAP-Kristallen eingebettet. Für die hohe Belastbarkeit der Biostruktur sind innere Spannungen verantwortlich, wie die Wissenschaftler um Dr. Jean-Baptiste Forien und Dr. Paul Zaslansky vom Julius Wolff Institut der Charité bereits nachweisen konnten.

### Wechselwirkung zwischen Nanopartikeln und Kollagenfasern

Die innere Vorspannung innerhalb des Materials erklärt, warum sich kleinere Risse oder Sprünge im Zahnschmelz meist nicht weiter im intakten Dentin ausbreiten. Nun hat das Team um Zaslansky die Wechselwirkungen zwischen Nanopartikeln und Kollagenfasern in menschlichen Zahnproben genau vermessen: „Erstmals konnten wir nicht nur die Gitterkonstanten der cHAP-Kristalle in den Nanopartikeln präzise bestimmen, sondern gleichzeitig auch die Größen der Nanopartikel ermitteln. Dabei haben wir unter anderem festgestellt, welchen Belastungen sie prinzipiell standhalten können“, sagt Zaslansky. Einblicke in die winzigen Strukturen haben die Forscher in Laboren der Charité sowie durch Messungen an BESSY II erhalten. Die Synchrotronquelle des HZB erzeugt Strahlung vom Terahertz- bis in den Röntgenbereich.

In ihren Experimenten haben die Wissenschaftler den internen Druck in den Dentinproben erhöht. Dazu erhitzen sie die Proben auf 125 Grad Celsius, um sie auszutrocknen. Der Wasserverlust lässt die Kollagenfasern schrumpfen, die daraufhin hohen Druck auf die Nanopartikel ausüben. Mit bis zu 300 Megapascal entsprechen diese Druckverhältnisse der Streckfestigkeit von Baustahl und sind 15 Mal höher als



Die Kollagenfasern enthalten auch Wasser. Das Bild oben rechts zeigt eine Faser in normalem Zustand. Durch die Wärmebehandlung (Bild rechts unten) trocknet die Kollagenfaser aus, die Nanopartikel geraten unter extremen Druck.

der eigentliche Kaudruck, der üblicherweise weit unter 20 Megapascal liegt. Während der Wärmebehandlung wurden die Proteinfasern nicht zerstört, was auf eine Schutzwirkung der mineralischen Nanopartikel hindeutet.

Die Auswertung der Daten zeigt zudem, dass das Gitter der cHAP-Mineralkristalle im Zahn von außen nach innen kleiner wird. „Gewebe nahe des Zahnmarks, das sich in späteren Stadien der Zahnentwicklung gebildet hat, enthält Mineralpartikel mit kleineren Einheitszellen“, stellt Zaslansky fest. Die Größe der Nanopartikel verhält sich ebenso: Während sie in der Zahnwurzel außen, in Richtung des sogenannten Zements, noch etwa 36 Nanometer lang sind, weisen sie im Inneren des Zahnbeins, in Richtung der Pulpa, nur noch 25 Nanometer Länge auf.

### Vorbild für Zahnfüllungen

Mit seinen raffinierten Strukturen könnte das Zahnbein Vorbild bei der Entwicklung neuer Materialien sein, beispielsweise für Zahnfüllungen. „Die Architektur des Dentins ist deutlich komplexer als erwartet. Während der Zahnschmelz sehr hart, aber auch spröde ist, üben die organischen Fasern im Dentin genau den richtigen Druck auf die mineralischen Nanopartikel aus, um das Zahnbein insgesamt noch belastbarer zu machen“, so die Wissenschaftler. Das gilt

zumindest, solange der Zahn intakt ist. Kariesbakterien lösen nicht nur den mineralischen Zahnschmelz, sondern produzieren auch Enzyme, die die Kollagenfasern zerstören. Damit kann der Zahn leichter brechen. Entscheidend sind die Ergebnisse der aktuellen Untersuchung insbesondere auch für die Zahnmedizin in der täglichen Anwendung: „Zähne sollten während einer Behandlung, etwa dem Einbringen von Füllungen oder dem Befestigen von Kronen,

nass sein und nicht zu stark erwärmt werden. Das vermeidet internen Druck und kann zu nachhaltigeren Behandlungserfolgen führen“, resümiert Zaslansky. *arö/Charité*

Chemistry of Materials, 2016, 28 (10), pp 3416–3427 (DOI: 10.1021/acs.chemmater.6b00811): Water-Mediated Collagen and Mineral Nanoparticle Interactions Guide Functional Deformation of Human Tooth Dentin; J.-B. Forien et. al.

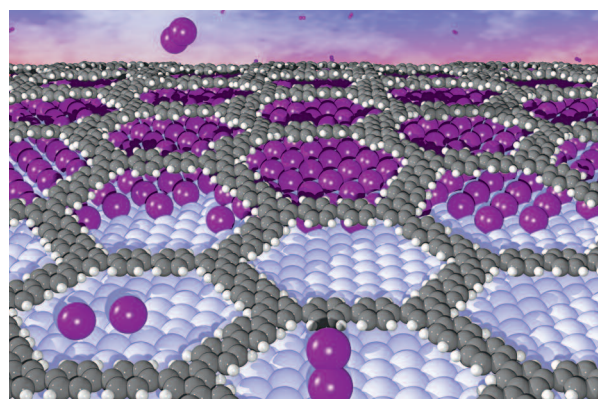
## SANFTES ENTKOPPELN LEGT NANOSTRUKTUREN FREI

Ein internationales Team hat an BESSY II einen raffinierten Weg gefunden, um organische Nanostrukturen von Metalloberflächen abzukoppeln. Dies könnte ein Weg sein, um **Nanostrukturen von Metalloberflächen** auf andere Oberflächen zu übertragen, die sich besser für molekulare Elektronik eignen.

**M**anche organische Moleküle vernetzen sich über chemische Bindungen zu ausgedehnten Nanostrukturen – typischerweise auf reaktiven Metalloberflächen. So können sehr stabile zweidimensionale molekulare Netze entstehen. Allerdings haften diese Netze auch fest auf dem metallischen Untergrund, was ihre natürlichen Eigenschaften stark beeinflusst. Um solche organischen Netze beispielsweise in der Molekularelektronik zu nutzen, müsste man das Metall aufwändig entfernen. Nun hat ein Team um PD Dr. Markus Lackinger von der TU München und dem Deutschen Museum zusammen mit Partnern anderer Universitäten in Deutschland und Schweden einen raffinierten Weg gefunden, um die Haftung zwischen Netz und Metall zu reduzieren: „Nach der Synthese des Netzwerks auf einer Silberoberfläche haben wir gasförmiges Jod eingesetzt. Wir hatten gehofft, dass Jod zwischen die organische Schicht und das Metall einwandert“, erklärt Lackinger. Die Probe bestand aus Phenylringen, die sich auf einer Silberoberfläche zu einer Nanostruktur (Polyphenylen) vernetzten. Tatsächlich wanderte Jod unter die vernetzten Phenylringe und bildete eine atomar dünne Zwischenschicht zur Metalloberfläche. Die Messungen an BESSY II belegten: Nach dem Einwandern von Jod verhielt sich das molekulare Netz fast wie ein freistehendes Netz.

### Neue Stempeltechniken denkbar

Die Ergebnisse sind im Hinblick auf künftige Anwendungen sehr interessant: „Molekulare Nanostrukturen wachsen



Die Grafik veranschaulicht, wie Jodatome (lila) zwischen das organische Netz und die metallische Unterlage wandern und so die Haftung reduzieren.

nicht auf allen Oberflächen. Daher müssen wir Stempeltechniken entwickeln“, sagt Markus Lackinger. „Dann könnten wir die Nanostrukturen auf Metalloberflächen herstellen und sie mit Stempeln auf andere Oberflächen übertragen, die für die Molekularelektronik besser geeignet sind. Dass wir mit einer Zwischenschicht Jod die Haftung der Netze reduzieren können, ist vielleicht ein erster Schritt in diese Richtung.“ *arö*

Angewandte Chemie, Int. Ed., Vol. 55, Issue 27, pp 7650-7654 (DOI: 10.1002/anie.201600684): Post-Synthetic Decoupling of On-Surface Synthesized Covalent Nanostructures from Ag(111), A. Rastgoo-Lahrood et. al.

## NEUES HZB-INSTITUT FÜR ENERGIE-MATERIALIEN

**DR. CATHERINE DUBOURDIEU** LEITET SEIT APRIL 2016 DAS INSTITUT „FUNKTIONALE OXIDE FÜR DIE ENERGIEEFFIZIENTE INFORMATIONSTECHNOLOGIE“.

Das HZB hat 2016 seine Energiematerial-Forschung gestärkt und ein neues Institut aufgebaut. Dank der Helmholtz-Rekrutierungsinitiative konnte das HZB die renommierte Forscherin Catherine Dubourdieu als Institutsleiterin gewinnen. In dem neu gegründeten Institut „Funktionale Oxide für die energieeffiziente Informationstechnologie“ erforscht sie Dünnschichten aus Metalloxiden, die besonders interessante Kandidaten für die Informationstechnologie der Zukunft sind. Nach Stationen in Frankreich und den USA wechselte Catherine Dubourdieu vom Institut

„Nanotechnologies de Lyon“ des Centre national de la recherche scientifique in Paris (CNRS) an das HZB und gilt als internationale Expertin auf ihrem Forschungsgebiet der funktionalen Oxide. Darunter versteht man Dünnschichten aus Metalloxiden, die als besonders interessante Materialklasse für energieeffiziente Bauelemente gelten. Stapelt man dünne Schichten aus ver-



schiedenen Metalloxiden übereinander, zeigen diese „Sandwich-Strukturen“ ganz neue mechanische, optische und elektromagnetische Eigenschaften. An der Synchrotronquelle BESSY II steht Dr. Catherine Dubourdieu eine

große Vielfalt an Instrumenten zur Verfügung, mit denen sie Prozesse in Energie-Materialien *in situ* oder *in operando* analysieren kann.

## HZB BAUT DAS HELMHOLTZ INNOVATION LAB HYSPRINT

**NEUE MATERIALKOMBINATIONEN UND PROZESSE FÜR ENERGIEANWENDUNGEN SIND DAS ZIEL.**

Die Helmholtz-Gemeinschaft fördert insgesamt sieben Helmholtz Innovation Labs, um den Transfer von Forschungsergebnissen in die Anwendung zu stärken. Sie stellt dafür bis 2020 circa zwölf Millionen Euro zur Verfügung. Der HZB-Antrag HySPRINT konnte sich dabei in einem Wettbewerbsverfahren unter 27 Konzepten durchsetzen. HySPRINT steht für „Hybrid Silicon Perovskite Research, Integration & Novel Technologies“. Im Mittelpunkt des Interesses stehen hybride Materialien und Bauelemente auf Basis von Silizium und Perowskitkristallen, die sowohl für die Energiewandlung in der Photovoltaik als auch für die solare Wasserstoffproduktion eingesetzt werden können.

„Dabei wollen wir die Silizium-Hybrid-Technologie, die Flüssigphasenkristallisation von Silizium, sowie die Nanoimprint-Lithographie und die Prototyp-Realisierung mittels 3D-Mikrokontaktierungstechniken gemeinsam mit Industriepartnern weiterentwickeln und das Potenzial für die Produktion aufzeigen“, sagt Prof. Dr. Bernd Rech vom HZB-Institut für Silizium-Photovoltaik und kommissarischer Geschäftsführer des HZB seit Mai 2017. Die Helmholtz-Gemeinschaft fördert das Projekt mit 1,9 Millionen Euro, dazu kommen Eigenanteile des HZB sowie der beteiligten Industriepartner.



## ERC ADVANCED GRANT FÜR PROF. FÖHLISCH

Der European Research Council fördert mit den Advanced Grants unkonventionelle und wegbereitende Forschung und unterstützt herausragende Spitzenforscher. Alexander Föhlisch ist Professor am Institut für Physik und Astronomie der Universität Potsdam und leitet am HZB das Institut für Methoden und Instrumentierung der Forschung mit Synchrotronstrahlung. Mit dem ERC Advanced Grant erhält er für seine Arbeit an hochselektiven Nachweisverfahren mit Synchrotronlicht und Röntgenlasern insgesamt 2,5 Millionen Euro für fünf Jahre. Das neue Forschungsprojekt trägt den Namen „Excited state Dynamics from Anti-Stokes and non-linear resonant inelastic X-ray scattering“ (EDAX). Föhlisch untersucht darin, wie sich chemische Reaktionspfade und Phasenübergangverhalten mit neuartigen röntgenspektroskopischen Verfahren sichtbar machen lassen. Sie dienen als Grundlage für eine effiziente Energiewandlung und zukünftige Informationstechnologien.

## ZWEI NACHWUCHSGRUPPEN FÜR PEROWSKITE

**DR. STEVE ALBRECHT UND DR. ANTONIO ABATE** FORSCHEN DARAN, DIE LEBENSDAUER VON PEROWSKIT-SOLARZELLEN ZU VERBESSERN.



Dr. Steve Albrecht forscht mit Mitteln des Bundesforschungsministeriums für eine nachhaltigere Energieversorgung der Zukunft.



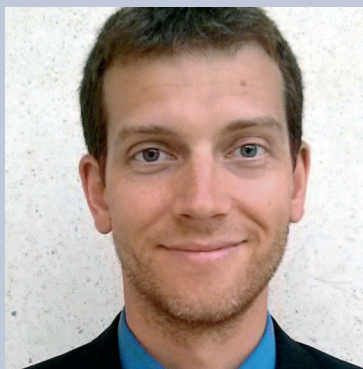
Dr. Antonio Abate baut eine Helmholtz-Nachwuchsgruppe am HZB auf. Er will die Lebensdauer von Perowskit-Solarzellen weiterentwickeln.

Dr. Steve Albrecht leitet seit Mitte 2016 die vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderte Nachwuchsgruppe „Perowskit-Tandem-Solarzellen“ am HZB. Dafür erhielt er Mittel für fünf Jahre, um sein eigenes Forschungsteam aufzubauen. Zusätzlich gibt es Mittel für Laborausbauten. Albrecht beschäftigt sich seit seiner Diplomarbeit mit Photovoltaik. 2014 promovierte er an der Universität Potsdam über organische Solarzellen. Anschließend zog es ihn direkt ans HZB, wo er seitdem an hybriden Tandemsolarzellen forscht. Mit dem Aufbau seiner eigenen Arbeitsgruppe möchte er Perowskit-Tandemsolarzellen voranbringen. „Solarzellen aus Silizium haben zwar einen hohen Wirkungsgrad und einen Marktanteil von etwa 90 Prozent. Doch der Wirkungsgrad lässt sich nicht mehr wesentlich erhöhen. Wenn man aber Silizium mit anderen Materialien verbindet, kann der Wirkungsgrad erhöht werden, und die Kosten sinken“, so der Nachwuchsforscher. Albrecht kombiniert nun Silizium und Perowskit zu Tandemsolarzellen. Der Vorteil: Zusammen können die Materialien mehr Energie des Sonnenlichts umwandeln als einzeln. Allerdings sind Perowskite noch nicht so stabil, um die gewünschten 20 Jahre zu halten.

Ende 2016 gab das HZB zudem bekannt, dass es mit der neuen Helmholtz-Nachwuchsgruppe „Aktive Materialien und Grenzflächen für stabile Perowskit-Solarzellen“ unter der Leitung von Dr. Antonio Abate die Forschung an Perowskit-Solarzellen weiter verstärkt. Der italienische Wissenschaftler, der zuvor an der Universität Fribourg in der Schweiz gearbeitet hatte, setzte sich in einem hochkompetitiven Verfahren der Helmholtz-Gemeinschaft durch und wird nun mit 300.000 Euro pro Jahr über einen Zeitraum von fünf Jahren gefördert. Abate will Materialien und Grenzflächen von Perowskit-Solarzellen untersuchen, um ihre Langzeitstabilität zu verbessern. Prof. Dr. Bernd Rech, der kommissarische wissenschaftliche Geschäftsführer des HZB, sagte: „Perowskit-Solarzellen sind eine der vielversprechendsten Materialklassen, die in den letzten Jahren entdeckt wurden. Das HZB ist bereits aktiv auf diesem Gebiet. Wir freuen uns sehr, dass diese nun durch Antonio Abate und seine neu aufzubauende Gruppe verstärkt werden. Dies hilft, zu schnellen Ergebnissen auf diesem Gebiet zu kommen.“ kk/sz

## NEUE HELMHOLTZ-NACHWUCHSGRUPPE AM HZB

**DR. MATTHEW T. MAYER** BAUT EINE HELMHOLTZ-NACHWUCHSGRUPPE AUF DEM GEBIET DER ENERGIEMATERIAL-FORSCHUNG AM HZB AUF.



Die Forschung steht vor der großen Herausforderung, neue Lösungsansätze zur Reduzierung des klimaschädlichen Ausstoßes von Kohlenstoffdioxid zu entwickeln. Eine Möglichkeit ist es, erneuerbare Energien zu nutzen, um Kohlenstoffdioxid und Wasser elektrochemisch umzuwandeln. Dadurch sollen Kohlenwasserstoffe wie Methan, Methanol oder Ethylen entstehen, die wichtige Rohstoffe für die chemische Industrie sind. Die größte Herausforderung dabei ist, die Energieeffizienz, die Reaktionsgeschwindigkeit und die Ausbeute bei der CO<sub>2</sub>-Katalyse zu verbessern. Matthew T. Meyer, der zuvor an der École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) arbeitete, will genau für diese Fragen die passenden Antworten finden. Für den Aufbau seiner Nachwuchsgruppe erhält Matthew Mayer 300.000 Euro pro Jahr für einen Zeitraum von fünf Jahren.

# HZB UND ANSTO VERTIEFEN WISSENSCHAFTLICHE ZUSAMMENARBEIT

ENERGIEMATERIAL-FORSCHUNG SOLL VORANGETRIEBEN WERDEN.



Die Geschäftsführung beider Institute bei der Unterzeichnung des Memorandums zur Vertiefung der Zusammenarbeit.

Die Verantwortlichen des HZB und der Australian Nuclear Science and Technology Organisation (ANSTO) haben Ende 2016 ihr Memorandum of Understanding deutlich erweitert, das seit 2015 besteht. Insbesondere wollen sie die Zusammenarbeit im Bereich der Energiematerial-Forschung weiter verstärken – durch den Austausch von Personal, Fortbildungen und den gegenseitigen Zugang zu Instrumenten an ihren Großgeräten. ANSTO liegt in der Nähe von Sydney und betreibt unter anderem eine Synchrotronquelle, den Forschungsreaktor OPAL und ein Zentrum für Neutronenstreuung. Von der Berliner Neutronenquelle BER II, die Ende 2019 abgeschaltet wird, übernimmt ANSTO das BioRef-Reflektometer.

Auch mit weiteren australischen Spitzeneinrichtungen hat das HZB die Kooperation verstärkt. So hat die renommierte Monash-University in Melbourne im Sommer 2016 drei HZB-Wissenschaftler aus dem Bereich der Energiematerial-Forschung zu außerplanmäßigen Professoren ernannt: Prof. Dr. Klaus Lips, Dr. Alexander Schnegg und Prof. Dr. Emad Aziz können Workshops und Blockseminare an der Monash-University halten und gemeinsame Forschungsprojekte vorantreiben.

## ERSTE ABSOLVENTEN DER GRADUIERTENSCHULE MATSEC

DIE ERSTEN VIER STUDIERENDEN DER GRADUIERTENSCHULE **MATERIALS FOR SOLAR ENERGY CONVERSION (MATSEC)** HABEN ERFOLGREICH IHRE PROMOTION ABGESCHLOSSEN.

MatSEC ist die erste Graduiertenschule, die das HZB 2013 unter dem Dach der Dahlem Research School und in Zusammenarbeit mit mehreren Universitäten der Region aufgebaut hat. Im Sommersemester 2013 und Wintersemester 2013/2014 hatten die ersten sieben Doktorandinnen und Doktoranden an der neu eingerichteten Graduiertenschule MatSEC mit ihrer Promotion begonnen.

Im Dezember 2016 promovierten jetzt die ersten vier Absolventinnen und Absolventen: Anna Ritscher an der Technischen Universität Berlin, Marcel Quennet und Laura Elisa Valle Rios an der

Freien Universität Berlin sowie Kai Neldner an der Freien Universität Berlin.

Für die Zukunft ist die Graduiertenschule gut aufgestellt: „Wir führen MatSEC nun mit einem deutlich breiteren Forschungsportfolio weiter“, erklärt Prof. Dr. Susan Schorr, die Sprecherin der Graduiertenschule. Dabei konnten die Organisatoren neue, internationale Kooperationspartner gewinnen: Mit dem Weizmann-Institute of Science in Rehovot und der Hebrew University in Jerusalem engagieren sich nun auch zwei sehr renommierte Forschungseinrichtungen aus Israel für MatSEC.

## WICHTIGE BERUFUNGEN

**Prof. Dr. Bella Lake**, Leiterin der Abteilung Quantenphänomene in neuen Materialien, hat in einem gemeinsamen Berufungsverfahren von Technischer Universität Berlin und HZB eine W3-Professur erhalten. Sie hat den Ruf zum 1. Dezember 2016 angenommen.

**Prof. Dr. Yan Lu**, Gruppenleiterin im HZB-Institut „Weiche Materie und Funktionale Materialien“, hat einen Ruf auf eine W2-Professur an der Universität Potsdam erhalten und angenommen.

**Prof. Dr. Kathrin Aziz-Lange**, Leiterin der Helmholtz-Nachwuchsgruppe „Operando Characterization of Solar Fuel Materials“, wurde am 1. November an der Universität Bielefeld zur Juniorprofessorin ernannt.

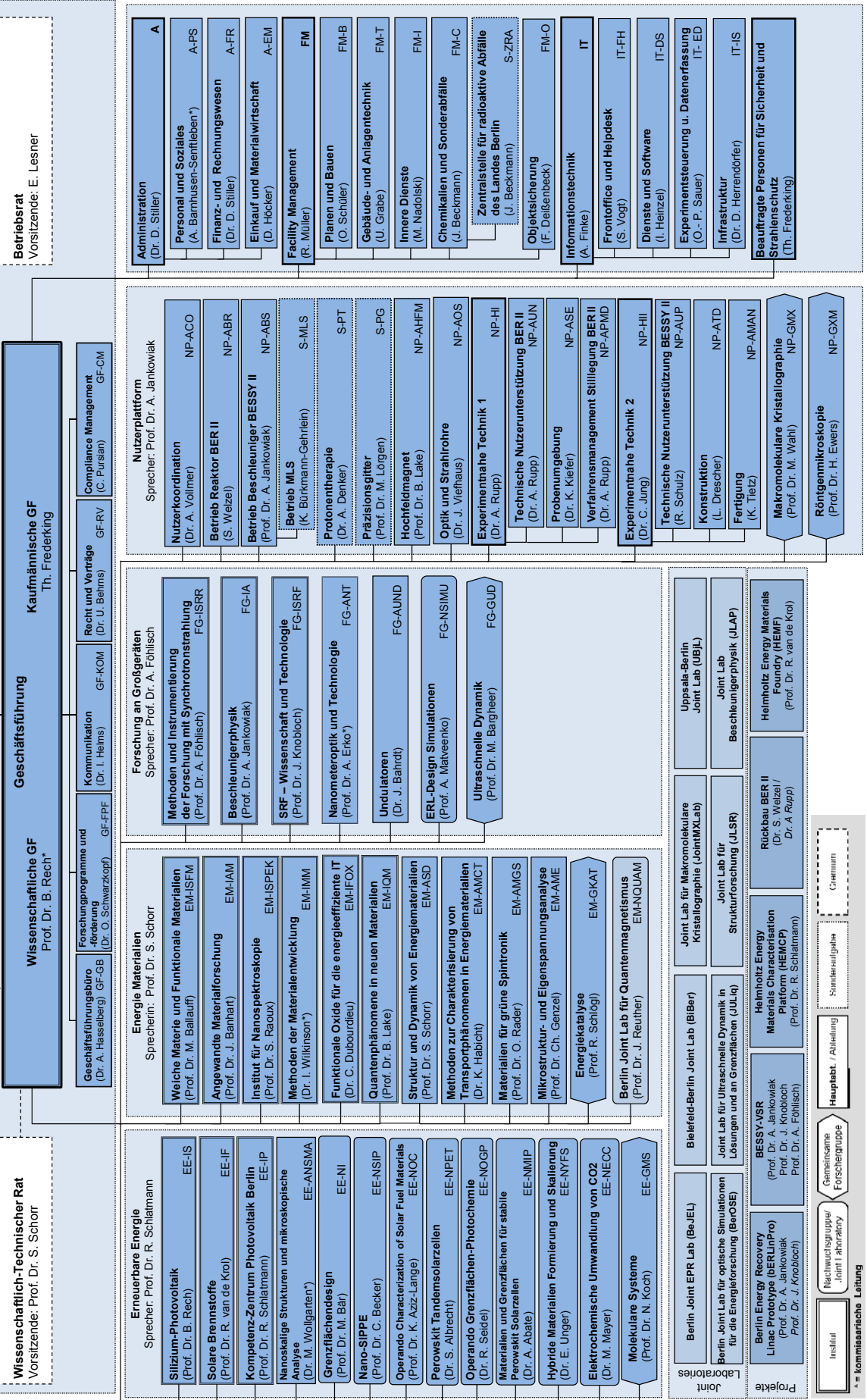
**Prof. Dr. Marcus Lörger**, Leiter der Abteilung Präzisionsgitter, hat einen Ruf auf eine W2-Professur an die HTW Berlin erhalten, die er zum 1. Februar 2017 antreten wird.

**Wissenschaftlicher Beirat**  
Vorsitzende: Prof. Dr. Jack Fletcher

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

**Gesellschafterversammlung**  
(Bund und Land Berlin)

**Aufsichtsrat**  
(Vorsitzende: Dr. K. E. Huthmacher)



\* = Kommissarische Leitung

## 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.



## Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie

### IMPRESSUM

**HZB-Highlight-Bericht 2016** des Helmholtz-Zentrums Berlin für Materialien und Energie GmbH. Nachdruck nur mit ausdrücklicher Genehmigung des Herausgebers.  
Redaktionsschluss: Juli 2016

#### 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.), Hannes Schlender (hs, Gesamtkoordination), Antonia Rötger (arö), Silvia Zerbe (sz), Eugen Weschke (ew), 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

**Mitarbeiter:** Ralf Butscher (rb), Volker Eidems (ve), 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 beim HZB, außer: Titel HZB/ Michael Setzpfandt, S. 2/3 HZB/Sibylle Grunze, S. 4-7 HZB/ Michael Setzpfandt, S. 8 HZB/Hans Georg Conradi, S. 10 Anto, S. 13 University of Tokio, S. 18 Leah Weiss, Cambridge, S. 19 HZB/Daniel Ausserhofer, S. 20/21 HZB/D. Többens, S. 22 TU Dresden, Prof. AC1, S. 24 HZB/Hans Georg Conradi, S. 25 HZB/Uwe Müller, S. 27 HZB/Tobias Lau, S. 29 HZB/Silvia Zerbe, S. 30/31 HZB/ Michael Setzpfandt, S. 32 euroluftbild.de/Robert Grahn, S. 33 HZB/Stefanie Kodalle, S. 34 HZB/Erik Werner, S. 35 HZB/Stefanie Kodalle, S. 36 BP, WZS, S. 37 Kai M. Litzius, S. 38 Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf/Sebastian Wintz, S. 39 Ralle Nordström, S. 40 Bundesverband Solarwirtschaft, S. 41 ACS Nano Letters, S. 42 HZB/Heike Cords, S. 44 FAU Erlangen-Nürnberg/Christian Papp, S. 45 ESA/G. Porter, S. 46 HZB/Felix Lang, S. 47 Thomas Spletstößer, S. 48 L. Bumba, S. 49 Jean-Baptiste Forien, S. 50 IFM, University of Linköping, S. 51 HZB/Michael Setzpfandt, S. 52 htgrahn, S. 53 ANSTO

## 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