

Wuppertal Center for Smart Materials & Systems

Aktivitäten 18/19





Prof. Dr. rer. nat. Thomas Riedl
Leiter des Wuppertal Center
for Smart Materials & Systems
Lehrstuhl für Elektronische Bauelemente
Fakultät für Elektrotechnik,
Medientechnik und Informationstechnik

#### Editorial

Unser Interdisziplinäres Zentrum (seit 2004 Institut für Polymertechnologie) hat in den letzten Jahren einen Generationenwechsel vollzogen, der auch einen Wandel in der thematischen Ausrichtung des Zentrums mit sich gebracht hat. Das Zentrum möchte diesen Wandel nunmehr auch mit einem neuen Namen zum Ausdruck bringen: Wuppertal Center for Smart Materials & Systems, oder kurz CM@S (CMatS). Die thematische Beschränkung auf Polymere wird auch nach außen erkennbar aufgehoben. Wie Sie dem Bericht über unsere Aktivitäten (u.a. eingeworbene Drittmittelprojekte, Publikationen, Kolloquiumsvorträge) in dieser Broschüre entnehmen können, hat sich das thematische Spektrum der Forschung geweitet, ohne dabei beliebig geworden zu sein. Der Dreiklang aus Material, Funktionalität und System bleibt bestehen. Unsere Forschungsprojekte sind ein sehr erfreulicher Ausdruck für den Schulterschluss von Chemie, Physik und Ingenieurwissenschaften, und damit interdisziplinär. Besonders erfreulich ist der hohe Anteil an DFG-Projekten von 75% am gesamten Drittmittelaufkommen. Damit sieht sich das Zentrum bestens aufgestellt für nun anstehende strukturierte Maßnahmen aus dem CM@S heraus. Zahlreiche gemeinsame Publikationen sind das Ergebnis erfolgreicher interdisziplinärer Arbeit im CM@S, und auch in Zukunft steht die internationale Spitzenforschung im Fokus des CM@S.

Aber sehen Sie selbst!

Ihr Thomas Riedl

# Wuppertal Center for Smart Materials & Systems

## Aktivitäten 2018/2019

### **Inhaltsverzeichnis**

Editorial	Seite 01
Mission des Wuppertal Center for Smart Materials & Systems	Seite 04
Das Team des Wuppertal Center for Smart Materials & Systems	Seite 05
Promotionen in den Jahren 2018/2019	Seite 07
Ausgewählte Publikationen im Berichtzeitraum	Seite 07
Kolloquien im Wuppertal Center for Smart Materials & Systems	Seite 09
Eingeworbene Drittmittel laufender Projekte	Seite 09
DFG-Projekt: Modellierung und Simulation der Interphaseneigenschaften von Kompositwerkstoffen aus Metall und Polymer auf der Nanoskala	Seite 10
EU-Projekt: Hybrid Node Modes for Highly Efficient Light Concentrators (HyMoCo)	Seite 12
EFRE-Projekt: Schaltbare Wellenleiter für neuartige Laserdisplays, WaveGuide Display (WaGuDi)	Seite 14
BMBF-Verbundprojekt: Superconducting Radio-Frequency Cavity Developments for Future Accelerators	Seite 16
BMBF-Verbundprojekt: Oberflächensensitive Röntgenabsorptionsspektroskopie mit Zeitauflösung	Seite 18
BMBF Verbundprojekt 05H2018 – R&D Beschleuniger (STEnCiL)	Seite 20
DFG-Projekt: Metall-Oxide TFT Technologieplatform für flexible Schalt- kreise in der drahtlosen RF-Kommunikation – Phase 1 & 2 (10by10.com)	
SPP1796	Seite 22
DFG-Projekt: Invertierte Fulleren-freie organische Solarzellen: Ladungsträgerextraktion und Grenzflächenanalyse	Seite 24
DFG-Projekt: Hybride Tandem-Solarzellen auf Basis von Organometall- Halid Perowskit-Zellen und organischen Solarzellen mit kleiner	
Energielücke (MUJUPO)	Seite 26

EFRE Projekt: PerovsKET – Verbesserung der Mikrostruktur von Perowskiten mittels thermischem Nanoimprint als Schlüsseltechnologie für großflächige Perowskit-Optoelektronik	Seite 28
DFG-Projekt: Grundlagenuntersuchungen zum Wachstum ultradünner Metallfilme mittels plasmaunterstützter, räumlich sequenzieller Atomla- genabscheidung bei Atmosphärendruck	Seite 30
BMWI-ZIM: Atomlagenätzen (ALE)	Seite 32
DFG-Projekt: Nanoskopische Erfassung des anisotropen Wärmetransports	Seite 34
DFG-Projekt: Graphene-basierende, zweidimensionale poröse und ionische Polymernetzwerke und Kohlenstoff-Nanosheets für die Anwendung in Superkondensatoren	Seite 36
DFG-Projekt: Photoprozesse in der Lehre der MINT-Fächer, Photo-MINT / TA 228/4-2	Seite 38
DFG-Project: Specific Heat Capacity Enhancement in a Nanofluid Studied via Molecular Dynamics Computer Simulation	Seite 40
Industry-Project : Dynamic Moduli of Elastomer Nano-Composites via Molecular Modelling	Seite 42
Impressum	Seite 44

### Mission des Wuppertal Center for Smart Materials & Systems

Die Materialforschung war seit jeher der Ausgangspunkt grundlegender Veränderungen unseres täglichen Lebens. Man denke nur an Halbleiter: Als Plattform für unsere digitale Gesellschaft sind sie die Grundlage für die Kommunikationstechnologie der nächsten Generation, ermöglichen Quantencomputer und neuartige Energiewandlungssysteme. Vor diesem Hintergrund arbeitet das CM@S in einem interdisziplinären Schulterschluss von Chemikern, Physikern und Ingenieuren an neuen Materialien, smarten Bauelementen und Systemen, die Auswirkungen auf verschiedene Bereiche von höchster gesellschaftlicher Relevanz haben.

Energy – Die Materialforschung ist der Treiber für den Fortschritt auf dem Gebiet zukünftiger Energiewandlung und -speicherung. Dazu zählen die Photovoltaik, Power2fuel, und Thermoelektrik, sowie Batterien und Superkondensatoren. Unser Ziel ist es, nachhaltige und umweltfreundliche Wege zu effizienteren, vielseitigen und überall verfügbaren Systemen zu finden, um nachhaltige Energieumwandlung und -speicherung für die Zukunft möglich zu machen.

Connectivity – Drahtlose Verbindungstechnologien bilden die Grundlage einer grenzenlos vernetzten Gesellschaft von morgen. Die Virtualisierung von Prozessen und Internet-Of-Things (IoT)-Anwendungen erfordern allgegenwärtige drahtlose Verbindungen mit Edge-Computing und verteilten Cloud-Funktionen. Wir verfolgen innovative Ansätze im Terahertz- und optischen Spektralbereich mit dem Ziel, neue drahtlose Verbindungstechnologien zu entwickeln. Hierfür kombinieren wir zukunftsweisende Halbleitertechnologien, Schaltungen und Antennen mit neuen Materialien und Komponenten, um die drahtlose Hochgeschwindigkeitskommunikation der Zukunft zu ermöglichen.

Security – Öffentliche und persönliche Sicherheit wird durch Sensoren und Sensorsysteme ermöglicht, die potentielle Gefahren identifizieren, bevor schädliche Konsequenzen auftreten. Persönliche und mobile Systeme, die Vitalfunktionen und das persönliche Wohlbefinden überwachen, sind nicht nur für unsere alternde Gesellschaft von enormer Wichtigkeit, sondern sie sind auch wichtige Hilfsmittel für jüngere, sportlich aktive Menschen. In Smartphones integrierte Sensoren für giftige Gase wie Kohlenmonoxid, Stickoxid usw. bieten Sicherheit für jeden Einzelnen und können als Teil eines intelligenten Sensornetzwerks auch die Sicherheit der gesamten Gemeinschaft verbessern. Neuartige Materialien ermöglichen für diese Anwendungen neuartige Elektronik, die am oder sogar im Körper getragen werden kann. Science-Fiction wird Realität - im besten Sinne.

### Das Team des Wuppertal Center for Smart Materials & Systems



von l.n.r: Dr. Michael Forster, Dr. Ralf Heiderhoff, Dr. Detlef Theirich, Prof. Dr. Ulrich Jung, Prof. Dr. Claudia Bohrmann-Prof. Dr. Ulrich Pfeiffer, Prof. Dr. Ullrich Scherf, Prof. Dr. Michael W. Tausch, Prof. Dr. Patrick Görrn, Prof. Dr. Thomas Riedl.



Prof. Dr. Thomas Riedl Leiter des Wuppertal Center for Smart Materials & Systems & Lehrstuhl für Elektronische Bauelemente Fakultät für Elektrotechnik, Informationstechnik und Medientechnik Rainer-Gruentner-Str. 21 42119 Wuppertal Tel.: +49 (0) 202 439 1411 E-Mail: t.riedl@uni-wuppertal.de



Prof. Dr. Ullrich Scherf Stv. Leiter des Wuppertal Center for Smart Materials & Systems & Lehrstuhl für Makromolekulare Chemie Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften Gaußstr. 20 42119 Wuppertal Tel.: +49 (0) 202 439 2493 E-Mail: scherf@uni-wuppertal.de



Prof. Dr. Swantje Bargmann Fachgebiet für Computergestützte Modellierung in der Produktentwicklung Fakultät für Machinenbau und Sicherheitstechnik Gaußstr. 20 42119 Wuppertal Tel.: +49 (0) 202 439 2075

E-Mail:bargmann@uni-wuppertal.de



Prof. Dr. Claudia Bohrmann-Linde Lehrstuhlinhaberin des Lehrstuhls Didaktik der Chemie Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften Gaußstr. 20 42119 Wuppertal Tel.: +49 (0) 202 439 3437

E-Mail: bohrmann@uni-wuppertal.de



Dr. Michael Forster
Lehrstuhl für Makromolekulare
Chemie
Fakultät für Mathematik und
Naturwissenschaften
Gaußstr. 20
42119 Wuppertal
Tel.: +49 (0) 202 439 3872
E-Mail: mforster@uni-wuppertal.de



Prof. Dr. Patrick Görrn
Lehrstuhl für Großflächige
Optoelektronik
Fakultät für Elektrotechnik,
Informationstechnik und
Medientechnik
Rainer-Gruentner-Str. 21
42119 Wuppertal
Tel.: +49 (0) 202 439 1424

E-Mail: goerrn@uni-wuppertal.de



Dr. Ralf Heiderhoff Lehrstuhl für Elektronik Fakultät für Elektrotechnik, Informationstechnik, Medientechnik Rainer-Gruenter-Str. 21 42119 Wuppertal Tel.: +49 (0) 202 439 1966

Tel.: +49 (0) 202 439 1966
E-Mail: heiderho@uni-wuppertal.de



Prof. Dr. Ulrich Jung
Lehrstuhl für Digital- und Offsetdruck
Fakultät für Elektrotechnik,
Informationstechnik und
Medientechnik
Rainer-Gruentner-Str. 21
42119 Wuppertal
Tel.: +49 (0) 202 439 1311

E-Mail: ujung@uni-wuppertal.de



apl. Prof. Dr. Dirk Lützenkirchen-Hecht Lehrstuhl für Kondensierte Materie - Röntgenphysik Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften Gaußstr. 20 42119 Wuppertal

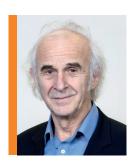
Tel.: +49 (0) 202 439 3102 E-Mail: dirklh@uni-wuppertal.de



Prof. Dr. Ulrich Pfeiffer
Lehrstuhl für Hochfrequenzsysteme
in der Kommunikationstechnik
Fakultät für Elektrotechnik,
Informationstechnik und
Medientechnik
Rainer-Gruenter-Str. 21
42119 Wuppertal

Tel.: +49 (0) 202 439 1451

E-Mail: ullrich.pfeiffer@uni-wuppertal.de



Prof. Dr. Michael W. Tausch Lehrstuhl für Chemie und ihre Didaktik Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften Gaußstr. 20 42119 Wuppertal

Tel.: +49 (0) 202 439 3466

E-Mail: mtausch@uni-wuppertal.de



Dr. Detlef Theirich
Lehrstuhl für Elektronische
Bauelemente
Fakultät für Elektrotechnik,
Informationstechnik,
Medientechnik
Rainer-Gruenter-Str. 21
42119 Wuppertal

Tel.: +49 (0) 202 439 1418

E-Mail: theirich@uni-wuppertal.de

#### Promotionen in den Jahren 2018/2019

- Sebnem Baysec: Organic sensitizers and luminogens for optoelectronic devices (2019)
- Sven Engelmann: Transport- und Gleichgewichtseigenschaften molekularer Systeme via Simulation (2019)
- r Norman Gundlach: Modeling Filler Flocculation in Elastomers an Approach Based on Surface Free Energies and Monte Carlo Simulation (2019)
- Stefan Malz: Silicon Integrated Radio Front-End Design for 100 Gbit/s and Beyond (2019)
- <sup>r</sup> Andreas Polywka: Strukturierung von Silberdünnschichten mit optimierten optischen und mechanischen Eigenschaften (2019)
- r Sebastian Spinnen: Molekulare Logik mit farbabsorbierenden und farbemittierenden Molekülen auf der Basis von Spiropyran (2019)
- Florian Alexander Trilling: Donor-Akzeptor-Copolymere und Leiterpolymere aus oligocyclischen Strukturbausteinen (2019)
- Lukas Hoffmann: Spatial atomic layer deposition of electrically (non-)conductive gas diffusion barriers (2018)
- Tina Keller: Synthese von Low-Bandgap Donor-Akzeptor-Copolymeren durch Direkt-C-H-Arylierungs-Polykondensation (2018)
- Kim-Julia Kass: Neuartige, konjugierte Leiterpolymere und Donor-Akzeptor-Copolymere (2018)
- Andre Mayer: Self-assembled structures in thermal nanoimprint (2018)
- <sup>r</sup> Jan Meyer: Molekulare Modellierung der mechanischen Eigenschaften von elastomeren Nano-Kompositen (2018)
- Nico Meuter: Photolumineszenz und Photochromie in Lösungen und Feststoffmatrices Interaktionsbox Photo-Mol (2018)
- F Bennedeta Maria Squeo: BODIPY as building blocks for Near InfraRed-Active Organic Compounds (2018)

# **Ausgewählte Publikationen** im Berichtzeitraum; die vollständige Publikationsliste finden Sie auf der Homepage des Wuppertal Center for Smart Materials & Systems

- **7** A.C.B. Rodrigues, I.S. Geisler, P. Klein, J. Pina, F.J.H. Neuhaus, E. Dreher, C.W. Lehmann, U. Scherf, J.S.S. de Melo: <u>Designing highly fluorescent, arylated poly(phenylene vinylene) s of intrinsic microporosity</u>
  J. Mater. Chem. C, Advance Article, 8, 2248 (2020)
- F E. Griffiths, J. Wilmers, S. Bargmann, D. Reddy: *Nanoporous metal based composites: giving polymers strength and making metals move* Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 137, 103848 (2020)
- F K. Yuan, D. Lützenkirchen-Hecht, L. Li, L. Shuai, Y. Li, R. Cao, M. Qiu, X. Zhuang, M. K. H. Leung, Y. Chen, U. Scherf: Boosting Oxygen Reduction of Single Iron Active Sites via Geometric and Electronic Engineering: Nitrogen and Phosphorus Dual Coordination J. Am. Chem. Soc. 142, 2404 (2020)
- <sup>r</sup> N. Pourdavoud, T. Haeger, A. Mayer, P. J. Cegielski, A. L. Giesecke, R. Heiderhoff, S. Olthof, S. Zaefferer, I. Shutsko, A. Henkel, D. Becker-Koch, M. Stein, M. Cehovski, O. Charfi, H.-H. Johannes, D. Rogalla, M. Lemme, M. Koch, Y. Vaynzof, K. Meerholz, W. Kowalsky, H.-C. Scheer, P. Görrn, and T. Riedl: *Room Temperature Stimulated Emission and Lasing in Recrystallized Cesium Lead Bromide Perovskite Thin Films* Adv. Mater. 31, 1903717 (2019).
- r T. Keller, T. Gahlmann, U. Scherf, and T. Riedl: <u>Direct Arylation Polycondensation (DAP) Synthesis of Alternating Quaterthiophene-Benzothiadiazole Copolymers for Organic Solar Cell Applications</u> ChemPlusChem 34, 1249 (2019).
- Y U. Kalita, C. Tückmantel, T. Riedl, and U. Pfeiffer: <u>Evaluation of the Beyond-fT Operation of an IGZO TFT-Based RF Self-Mixing Circuit</u> IEEE Microw. Wirel. Compon. Lett. 29, 119 (2019).
- r A.V. Zasedatelev, A.V. Baranikov, D. Urbonas, F. Scafirimuto, U. Scherf, T. Stöferle, R.F. Mahrt, P.G. Lagoudakis: A room-temperature organic polariton transistor Nature Photonics 13, 378 (2019)
- r R. Grandrath, C. Bohrmann-Linde: <u>Teaching Sustainability in the Chemistry Classroom: Exploring Fuel Cells in Simple Hands-on Experiments with Hydrogen, Sugar and Alcohol</u> World Journal of Chemical Education 7(2):172 (2019)

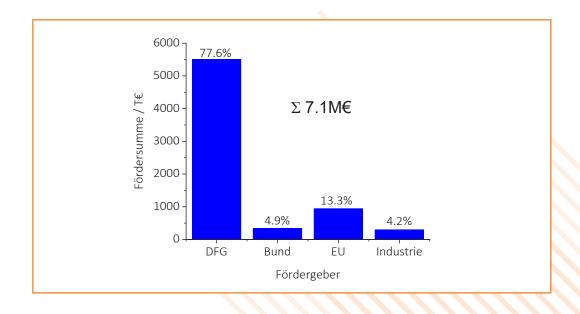
- r C. Bohrmann-Linde, S. Kleefeldt: Can You See the Heat? Using a Thermal Imaging Camera in the Chemistry Classroom World Journal of Chemical Education 7(2):179 (2019)
- Y I. Shutsko, C.M. Böttge, J. von Bargen, A. Henkel, M. Meudt, P. Görrn: <u>Enhanced hybrid optics by growing silver nanoparticles at local intensity hot spots</u> Nanophotonics 8 (9), 1457 (2019).
- Y U. R. Pfeiffer, P. Hillger, R. Jain, J. Grzyb, T. Bücher, Q. Cassar, G. MacGrogan, J. Guillet, P. Mounaix, T. Zimmer: Ex Vivo Breast Tumor Identification: Advances Toward a Silicon-Based Terahertz Near-Field Imaging Sensor IEEE Microwave Magazine 20(9), 32 (2019)
- r P.R. Vazquez, J. Grzyb, B. Heinemann, U.R. Pfeiffer: <u>A 16-QAM 100-Gb/s 1-M Wireless Link With an EVM of 17% at 230 GHz in an SiGe Technology</u> IEEE Microwave and Wireless Components Letters 29(4), 297 (2019)
- r P. Hillger, J. Grzyb, R. Jain, U.R. Pfeiffer: <u>Terahertz Imaging and Sensing Applications with Silicon-Based Technologies</u> IEEE Transactions on Terahertz Science and <u>Technology</u> 9(1), 1 (2019)
- R. Brunnert, Y. Yurdanur, M.W. Tausch: *Towards Artificial Photosynthesis in Science Education* World Journal of Chemical Education 7(2), 33 (2019)
- R. Brunnert, C. Bohrmann-Linde, N. Meuter, N.P. Vaz, S. Spinnen, Y. Yurdanur, M.W. Tausch: <u>Photons and Molecules:</u> <u>Basic Concepts of Photochemistry in Video Tutorials</u>
  EPA Newsletter Band 96 aus EPA Newsletter, 70 (2019)
- Y. Yurdanur, M. W. Tausch: Metamorphoses of an Experiment From Hightech UV Immersion Lamp Reactor to Low-Cost TicTac®-Cell CHEMKON 26(3), 125 (2019)
- r V. S. Mothika, A. Räupke, K. Brinkmann, T. Riedl, G. Brunklaus, and U. Scherf: *Nanometer-Thick Conjugated Micropo*rous *Polymer Films for Selective and Sensitive Vapor-Phase TNT Detection* ACS Appl. Nano Mater. 1, 6483 (2018).
- **r** N. Pourdavoud, A. Mayer, M. Buchmüller, K. Brinkmann, T. Häger, T. Hu, R. Heiderhoff, I. Shutsko, P. Görrn, Y. Chen, H.-C. Scheer, and T. Riedl: <u>Distributed Feedback Lasers Based on MAPbBr</u><sub>3</sub> Adv. Mater. Technol. 3, 1700253 (2018).
- <sup>r</sup> C. Soyarslan, S. Bargmann, M. Pradas, J. Weissmüller: <u>3d stochastic bicontinuous microstructures: generation, topology and elasticity</u> Acta Materialia 149, 326 (2018)
- r S. Bargmann, B. Klusemann, J. Markmann, J. Schnabel, K. Schneider, C. Soyarslan, J. Wilmers: <u>Generation of 3d representative volume elements for heterogeneous materials: a review</u> Progress in Materials Science 96, 322-384 (2018)
- r C. Bohrmann-Linde, D. Zeller: *Photosensitizers for Photogalvanic Cells in the Chemistry Classroom* World Journal of Chemical Education 6(1), 36 (2018)
- <sup>r</sup> M. Meudt, T. Jakob, A. Polywka, L. Stegers, S. Kropp, S. Runke, M. Zang, M. Clemens, P. Görrn: <u>Plasmonic Black Metasurface by Transfer Printing</u> Advanced Materials Technologies 3 (11), 1800124 (2018).
- L. Janßen und U. Jung: <u>Variation of pinned and depinned three-phase contact line by different solvent ratios on glass to create uniform layer thicknesses</u> European Coating Symposium (ECS), Freiburg, Schweiz, (2018)
- F B. Gržeta, D. Lützenkirchen-Hecht, M. Vrankić, S. Bosnar, A. Šarić, M. Takahashi, D. Petrov, M. Bišćan: Environment of the Eu3+ Ion within Nanocrystalline Eu-doped BaAl2O4: Correlation of X-ray Diffraction, Mössbauer Spectroscopy, X-ray Absorption Spectroscopy and Photoluminescence Investigations Inorg. Chem. 57, 1744 (2018)
- Y J. Zhao, K. Brinkmann, T. Hu, N. Pourdavoud, T. Becker, T. Gahlmann, R. Heiderhoff, A. Polywka, P. Görrn, Y. Chen, B. Cheng, T. Riedl: <u>Self-Encapsulating Thermostable and Air-Resilient Semitransparent Perovskite Solar Cells</u>
  Adv. Energy Mater. 7, 1602599 (2017).
- F.K. Yuan, X. Zhuang, T. Hu, L. Shi, S. Sfaelou, U. Polnick, M. Forster, T. Pichler, T. Riedl, Y. Chen, X. Feng, U. Scherf: 2D-Heterostructures Derived from MoS<sub>2</sub>-Templated, Cobalt-Containing Conjugated Microporous Polymer Sandwiches for Oxygen Reduction Reaction and Electrochemical Energy Storage Chem ElectroChem 4, 709 (2017).
- F N. Pourdavoud, S. Wang, A. Mayer, T. Hu, Y. Chen, A. Marianovich, W. Kowalsky, R. Heiderhoff, H.-C. Scheer, T. Riedl: Photonic Nanostructures Patterned by Thermal Nanoimprint Directly into Organo-Metal Halide Perovskites
  Adv. Mater. 29, 1605003 (2017).
- K. Yuan, T. Hu, Y. Xu, R. Graf, L. Shi, M. Forster, T. Pichler, T. Riedl, Y. Chen, U. Scherf: <u>Nitrogen-doped porous carbon/graphene nanosheets derived from two-dimensional conjugated microporous polymer sandwiches with promising capacitive performance</u> Mater. Chem. Front. 1, 278 (2017).
- r K. Yuan, S. Sfaelou, M. Qiu, D. Lützenkirchen-Hecht, X. Zhuang, Y. Chen, C. Yuan, X. Feng, U. Scherf: <u>Synergetic</u> <u>Contribution of Boron and Fe-Nx Species in Porous Carbons toward Efficient Electrocatalysts for Oxygen Reduction Reaction</u> ACS Energy Letters 3, 252 (2017)
- <sup>r</sup> A. Polywka, C. Tückmantel, P. Görrn: *Light controlled assembly of silver nanoparticles* Scientific reports 7, 45144 (2017)

### Kolloquien im Wuppertal Center for Smart Materials & Systems

(montags, 16:00 Uhr, Hörsaal FZH3, Campus Freudenberg):

08.05.2017	Dr. Roie Yerushalmi The Hebrew University of Jerusalem	Band Gap Engineering and Defect Design of Metal Oxides using Molecular Layer Deposition
29.05.2017	Dr. Sandro Francesco Tedde Siemens Healthcare GmbH	Are organic and hybrid photodetector ready for commercial products?
26.06.2017	Prof. Dr. Rasmus Schröder Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg	Analytical electron microscopy for carbon materials: Teaching old tricks to a young horse
28.06.2017	Prof. Dr. Davronbek Matrasulov Uzbek Academy of Science	Soliton and exciton dynamics in conducting polymers: Metric graphs based approach
10.07.2017	Prof. Dr. Morten Madsen University of Southern Denmark	Crystalline MoOx hole transport layers for organic photovoltaic devices
26.10.2017	Prof. Dr. Bao-Hang Han National Center for Nanoscience and Technology, Beijing	Conjugated Porous Organic Polymers For Gas Capture and Separation
15.01.2018	Dr. Rachel C. Evans University of Cambridge	Material Engineering of Integrated ∏-Conjugated Lumo- phore-Hybrid Spectral Converters for Next Generation Luminescent Devices
11.07.2018	Dr. Selina Olthof Universität zu Köln	Photoelectron spectroscopy: a powerful tool to probe novel semiconducting materials
15.10.2018	Prof. Dr. Clivia M. Sotomayor Torres University of Barcelona University of Stockholm	Nanoscale heat transfer in Si membranes and phononic crystals
13.09.2019	Prof. Dr. Zhi Ning Chen National University of Singapore	Metantennas for 5G and B5G Wireless Communications
04.11.2019	Dr. Alexander Colsmann Karlsruhe Institute of Technology	Ferroelectricity in methylammonium lead iodide perovskite solar cells
20.01.2020	Prof. Dr. Yana Vaynzof Technical University of Dresden	Mapping the Energetic Landscape of Solution-Processed Organic Photovoltaic Devices

## Eingeworbene Drittmittel laufender Projekte



DFG-Projekt: Modellierung und Simulation der Interphaseneigenschaften von Kompositwerkstoffen aus Metall und Polymer auf der Nanoskala

Laufzeit: 01.10.2016 - 30.06.2020, Projektleiterin: Prof. Dr.-Ing. Swantje Bargmann, Budget: 425.000,- € Im DFG-Sonderforschungsbereich 986: "Maßgeschneiderte Multiskalige Materialsysteme – M3"

- Nano-strukturierte Materialien stehen dank ihrer hervorragenden mechanischen Eigenschaften bereits seit Jahren im Fokus der modernen Materialforschung. Besonders im Kontext funktionaler, smarter Werkstoffe zeigen Nanostrukturen herausragendes Potential basierend auf Grenzflächen- und Interphaseneffekte, die durch ihre (im Verhältnis zu Masse und Volumen) große Oberfläche verstärkt werden. Solche Effekte induzieren in den in diesem Projekt untersuchten Kompositen von elektroaktiven Polymeren und nanoporösen Metallen vollständig reversible, makroskopischen Verformungen als Reaktion auf elektrische Signale. Im Gegensatz zu den Grundmaterialien beweisen diese Komposite dabei sowohl mechanische Belastbarkeit als auch nennenswerte Dehnungen: Das Metallskelett verstärkt den Komposit und das Polymer bewegt ihn.
- Erste experimentellen Studien des Kompositwerkstoffs sind vielversprechend, aber um das volle Potential dieser Nanokompositaktuatoren in der Biomedizin oder als Schädigungssensoren in mechanischen Strukturen ausnutzen zu können, ist ein detailliertes theoretisches Verständnis der zugrundliegenden physikalischen Mechanismen notwendig. Unter Leitung von Prof. Bargmann werden an der BUW Materialmodelle entwickelt, die eine präzise numerische Vorhersage ihres Verhaltens ermöglichen. Die Modelle berücksichtigen die komplexen Interaktionen zwischen elektrischen Feldern, mechanischen Eigenschaften, Verformung und dem Ladungsträgertransport im Material. Numerische Simulationen erlauben es, effizient Parameter zu variieren und sogar gezielt Effekte ein- und auszuschalten.
- So werden essentielle Einsichten in die zugrundeliegenden physikalischen Prozesse gewonnen, die experimentell auf der Nanoskala nur schwer oder gar nicht zugänglich sind.



- Komposite von elektroaktiven Polymeren und nanoporösen Metallen zeichnen sich durch eine außergewöhnliche Struktur aus, in der beide Phasen einander vollständig durchdringen ohne unterbrochen zu werden. Damit ergeben sich kontinuierliche Lastpfade im Metall und ebensolche Transportpfade im Polymer. Diese Transportpfade sind die Grundlage für die Aktuatorik, denn eine chemoelektromechanische Kopplung im Polymer basiert auf Ionenfluss in einem von außen angelegten elektrischen Feld. Änderung der Ionenkonzentration im elektrischen Feld induziert mechanische Spannungen im Polymer, die zu makroskopischen Deformationen führen.
- Die Modellierung und Simulation der Transformation von elektrischen Signalen in Deformation erfordert also die Berücksichtigung von Transportprozessen, Interaktion von Ionen untereinander und mit dem elektrischen Feld sowie von induzierten mechanischen Spannungen und Dehnungen. Weiterhin werden die elektromechanischen Eigenschaften der Metall-Polymer-Grenzfläche modelliert. In Summe führt dies zu einem komplexen, hochgradig nichtlinearen und stark gekoppelten Modell. Die Kopplung der physikalischen Vorgänge im Komposit wird sowohl im mathematischen Modell als auch in der Simulation vollständig berücksichtigt.
- Sowohl die Struktur des Nanokomposits als auch die Ionenmobilitäten haben einen signifikanten Einfluss auf die Deformationsantwort des Aktuators. So kann eine Materialcharakteristik, die die mechanischen Eigenschaften verbessert, gleichzeitig den Ionentransport empfindlich stören. In numerischen Simulationen werden gezielt die Nanostruktur und Materialeigenschaften variiert, um diese Überlagerung physikalische Mechanismen zu untersuchen.

■ Das so gewonnene Verständnis der fundamentalen Aktuationsmechanismen erlaubt es, völlig neue und innovative Designprinzipien für Aktuatormaterialien zu formulieren. Um zum Beispiel optimalen lonentransport durch Polymerkanäle und große Dehnungen im selben Komposit zu ermöglichen, werden hierarchische Strukturen, in denen Mechanismen auf verschiedenen Längenskalen aktiviert werden, vorgeschlagen. Durch Ausnutzen der komplexen Interaktionen zwischen verschiedenen Materialeigenschaften kann das Kompositmaterial damit direkt auf die in der Anwendung benötigten Charakteristiken hin maßgeschneidert werden.

Abb. 1 Ionentransport innerhalb eines komplexen Netzwerks von Polymerkanälen, die die Metalphase durchdringen. Das Aufquellen des Polymers wird in makroskopische Deformation umgesetzt.

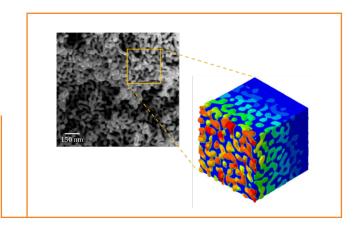




Abb. 2 Durch Veränderung des Volumenanteils der beiden Phasen wird nicht nur die mechanische Steifigkeit des Komposits beeinflusst sondern auch die Reaktionsgeschwindigkeit und die erreichbaren Aktuationsdehnungen.

- C. Soyarslan, H. Argeso, S. Bargmann (2018) Skeletonization-based beam finite element models for stochastic bicontinuous materials: application to simulations of nanoporous gold, Journal of Materials Research 33, 1 12.
- S. Bargmann, B. Klusemann, J. Markmann, J. Schnabel, K. Schneider, C. Soyarslan, J. Wilmers (2018)
- Generation of 3d representative volume elements (RVEs) for heterogeneous materials: a review, Progress in Materials Science 96, 322-384.

  7 J. Wilmers, S. Bargmann (2018) Functionalisation of metal-polymer-nanocomposites: Chemoelectro-mechanical coupling and charge carrier transport, Extreme Mechanics Letters 21, 57-64.
- C. Soyarslan, S. Bargmann, M. Pradas, J. Weissmüller (2018) 3d stochastic bicontinuous microstructures: generation, topology and elasticity, Acta Materialia 149, 326-340
- B. Elsner, S. Müller, S. Bargmann, J. Weißmüller (2017) Surface excess elasticity of gold: ab initio coefficients and impact on the effective elastic response of nanowires, Acta Materialia 124, 468-477.
- C. Soyarslan, E. Husser, S. Bargmann (2017) Effect of surface elasticity on the elastic response of nanoporous gold, Journal of Nanomechanics and Micromechanics 7, p 04017013-1-11.
- F. E. Griffiths, S. Bargmann, D. Reddy (2017) Elastic behaviour at the nanoscale of innovative composites of nanoporous gold and polymer, Extreme Mechanics Letters 17, 16-23.
- Y J. Wilmers, A. McBride, S. Bargmann (2017) Interface elasticity effects in polymer-filled nanoporous metals, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 99, 163-177.
- F. E. Griffiths, J. Wilmers, S. Bargmann, D. Reddy Nanoporous metal based composites: giving polymers strength and making metals move Journal of the Mechanics and Physics of Solids 137, 103848 (16 pages), 2020
- C. Soyarslan, V. Blümer, S. Bargmann Tunable auxeticity and elastomechanical symmetry in a class of very low density core-shell cubic crystals Acta Materialia 177, 280-292, 2019
- C. Soyarslan, M. Pradas, S. Bargmann Effective elastic properties of 3D stochastic bicontinuous composites Mechanics of Materials 137, 103098 (18 pages), 2019

Laufzeit: 01.03.2015 - 29.02.2020, Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. P. Görrn, Budget: 1,5 Mio. €

- Aktuelle Generationen von Photovoltaikmodulen nutzen lichtbündelnde Optiken wie Fresnel-Linsen zur Kostenreduktion durch eine Verkleinerung der Solarzellenfläche. Ähnlich zu Spiegelanordnungen in Concentrated Solar Plants existiert dabei ein durch die geometrische Optik fest vorgegebenes Verhältnis zwischen der Konzentration, der Effizienz und dem Aspektverhältnis der konzentrierenden Anordnung aufgrund der Vorrausetzung einer direkten Sichtlinie zwischen dem Empfänger und der konzentrierenden Optik. Die Kombination aus physikalischer Optik und geometrischer Optik könnte dieses Limit umgehen und damit den zukünftigen Weg der für die Energiewende äußerst wichtigen Photovoltaik ebnen.
- Die in Abbildung 1 abgebildete Vision von HyMoCo besteht in einer kostengünstigen Folie, die Sonnenlicht unter allen Einfallswinkeln sammelt, spektral aufteilt und auf Punkte fokussiert, bei denen man eine für die jeweilige Farbe optimale Solarzelle platzieren kann. Bei realistisch erreichbaren Konzentrationen von 1000 kann man die Kosten der Solarmodule um mehr als zwei Größenordnungen senken und gleichzeitig ihre Effizienz verdoppeln.

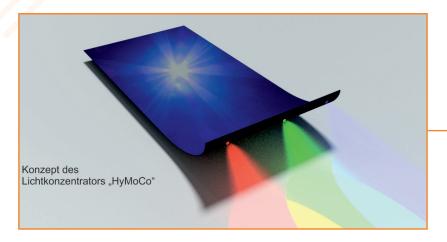


Abb. 1 Vision des Lichtkonzentrators "HyMoCo". Sonnenlicht wird gesammelt, spektral aufgespaltet und anschließend fokussiert.

- Das HyMoCo-Konzept basiert auf grundlegenden Prozessen der physikalischen Optik. In diesem Grenzfall weisen Lichtwellenleiter quantisierte Moden auf, im Idealfall genau zwei je Polarisationsrichtung. Diese quantisierten Moden lassen sich als stehende Lichtwellen zwischen den Grenzflächen des Lichtwellenleiters auffassen.
- Ähnlich zu den Schwingungsmoden von Obertönen auf einer eingespannten Saite weisen die Moden von Lichtwellenleitern Positionen, sogenannte Knoten, mit verschwindender Intensität auf. An diesen Knotenpositionen ist die stehende Welle unanfällig für Störungen. Diese Analogie führt die grundlegende Idee der Funktionsweise des HyMoCo-Konzepts ein.

■ Eine lichtkoppelnde Struktur kann an der Knotenposition des Wellenleiters "versteckt" werden, um gleichzeitig eine effiziente Lichteinkopplung und lateral nahezu ungestörte Ausbreitung der Mode zu gewährleisten.

Als Konsequenz wird zum Sammeln von Licht keine direkte Sichtlinie mehr benötigt und das Limit der Dicke geometrischer Konzentratoren gebrochen.

- In den ersten Jahren des HyMoCo-Projektes wurden zunächst grundlegende Experimente mit einfachen optischen Gitterstrukturen durchgeführt, durch die die in Abbildung 2 gezeigten Vorteile des Konzeptes nachgewiesen und ein grundlegendes Verständnis der neuartigen Lichtwellenleiter erlangt werden konnte. Zwar konnten mit diesen ersten Lichtwellenleitern bereits hohe Konzentrationsfaktoren nachgewiesen werden, jedoch müsste aufgrund der hoch dispersiven Eigenschaften der Gitterstrukturen eine technologisch anspruchsvolle vertikale Kaskadierung aufeinander abgestimmter Wellenleiter erfolgen, um das gesamte Sonnenspektrum abdecken zu können.
- Auf Basis dieser ersten Ergebnisse wurden nun weitergehende Konzepte zur Realisierung von Wellenleitern erarbeitet, die eine solche Kaskadierung vermeiden und mit wenigen Systemen breitbandig das gesamte Sonnenspektrum sammeln können. Diese werden gerade zum Patent angemeldet. Sie ermöglichen Konzentratoren für senkrecht einfallendes Licht, deren Aufbauhöhe im Vergleich zu heutigen Lichtkonzentratoren auf Basis von Fresnel-Linsen um etwa zwei Größenordnungen niedriger ist. Gleichzeitig steigern sie die Effizienzgrenze konzentrierter Photovoltaik (CPV) von heute 41% (einzelne Solarzelle) auf bis zu 86,8%, da sie die Aufteilung des Lichts in seine spektralen Komponenten erlauben und so die für jede Farbe optimale Solarzelle nutzen können.
- Da sich der Sonnenstand zeitlich ändert, braucht dieses neue Konzept entweder ein mechanisches Nachfahren (Sun Tracking), wie es in heutigen CPV-Systemen immer notwendig ist, oder ein integriertes Ablenken des Lichtstrahls (Beam Steering) innerhalb des Moduls ohne das Modul als Ganzes bewegen zu müssen. Bestehende Technologien nutzen beispielsweise Mikrokammern, in denen Lichtbre-

chung an der Grenzfläche zwischen zwei Flüssigkeiten erfolgt, deren Neigungswinkel mittels eines
elektrisch einstellbaren Kontaktwinkels über einen
großen Winkelbereich eingestellt werden und somit zur Strahlneigung verwendet werden kann. Im
HyMoCo-Projekt werden zudem alternative Methoden verfolgt, die auf neuartigen zeitabhängigen
Systemen basieren. Diese könnten zukünftig das
Konzentrationslimit statischer Systeme umgehen
und beispielsweise mittels dynamisch durch Licht
steuerbarer kolloidaler Nanopartikel realisiert werden.

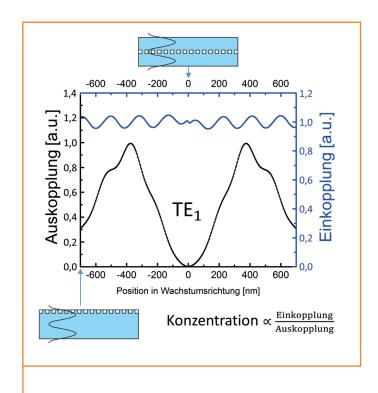


Abb. 2 Analytische Simulation der TE1-Mode eines Lichtwellenleiters mit eingebetter Gitterstruktur. Wenn die Gitterstruktur mit der Knotenposition der Mode zusammenfällt, sinkt die Auskopplung (schwarz) aus dem Wellenleiter nahezu auf null, während die Einkopplung (blau) konstant bleibt. Das Resultat ist eine starke Erhöhung der Konzentration.

Laufzeit: 01.01.2018 - 31.12.2019, Projektleiter: Prof. Dr. P. Görrn, Budget: 200.000,-€

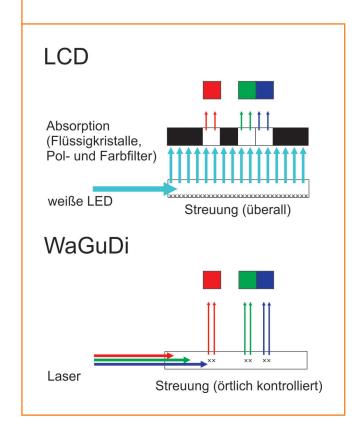
- Filmwellenleiter kommen bereits heute in verschiedenen Displaytechnologien zum Einsatz. Sie ermöglichen eine homogene Hintergrundbeleuchtung mit punktförmigen Lichtquellen. Dabei wird Licht aus Leuchtdioden geführt und durch gleichmäßiges Auskoppeln eine große leuchtende Fläche realisiert. Aktuelle Filmwellenleiter sind selbst nicht schaltbar. Das Adressieren der Pixel eines heutigen Displays erfolgt daher außerhalb des Wellenleiters, also erst dann, wenn das Licht den Wellenleiter bereits verlassen hat.
- Die Pixel werden geschaltet, indem Licht dort absorbiert wird, wo es nicht benötigt wird. Dies führt zu hohen Energieverlusten. Mit der dazu nötigen Pol- und Farbfilteranordnung absorbieren klassische LCD selbst bei weiß leuchtenden Pixeln etwa 70 bis 90% der Leuchtdichte. Bei schwarzen Pixeln wird idealerweise das gesamte Licht absorbiert.

WaGuDi begegnet diesem Grundproblem, die Information des Displays infolge einer Absorption zu bilden und infolgedessen viel Energie verschwenden zu müssen. Die Definition der Pixel soll nicht erst erfolgen, wenn das Licht den Wellenleiter bereits verlassen hat und somit für die weitere Nutzung verloren ist. Stattdessen soll nur das in einem bestimmten Pixel benötigte Licht an genau dieser Stelle aus dem Wellenleiter entnommen werden. So würde zum ersten Mal das Licht einer externen Lichtquelle für Displays nutzbar, ohne dass dies durch starke Absorption und somit hohen Energieverlust erkauft wird.

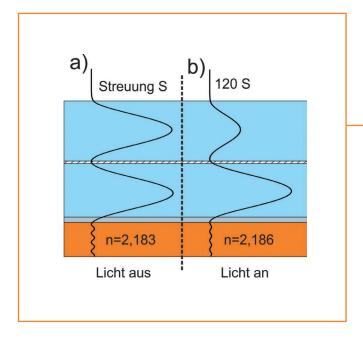
■ Im Projekt wird dabei auf Laser zur Beleuchtung der Wellenleiter gesetzt. Dadurch ist ein wesentlich größerer Farbraum möglich als bei einem Display auf Basis von Leuchtdioden (LCD und vor allem OLED). Das mit einem Laserdisplay erzeugte Bild, zeigt einen deutlich realistischeren Eindruck, als es mit herkömmlichen Displays möglich ist.



Abb. 1 Schematischer Vergleich des WaGuDi-Konzeptes mit einem herkömmlichen LCD-Display.



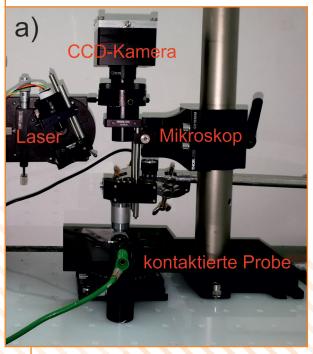
■ WaGuDi setzt zur technischen Realisierung eines derartig schaltbaren Wellenleiters auf Materialien, die einen elektrooptischen Effekt aufweisen. Durch Anlegen eines elektrischen Feldes kann der Brechungsindex lokal beeinflusst werden. Findet diese Änderung des Brechungsindizes im Bereich des Wellenleiters statt, kann so der Intensitätsverlauf einer geführten Mode verschoben werden. Bei einer sogenannten Knotenmode, die einen Bereich verschwindender Intensität aufweist, kann durch diese Verschiebung die Wechselwirkung mit beispielsweise einer streuenden Struktur deutlich erhöht werden. Durch elektrische Ansteuerung kann so lokal Licht aus dem Wellenleiter entnommen werden. Es wird eine Effizienz erwartet, die allen anderen emittierenden Displays überlegen ist.

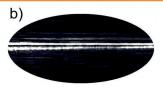


Neben der höheren Effizienz sind auch deutliche niedrigere Herstellungskosten zu erwarten. Durch die extrem schnellen Schaltzeiten des elektrooptischen Effektes kann auf eine teure Backplane, wie sie bei LCD, AMOLED und allen anderen modernen Displaytechnologien notwendig ist, verzichtet werden. Ebenso soll die spätere Bauform nur aus einem Folienverbund bestehen. Auf Farb- und Polarisationsfilter kann vollständig verzichtet werden. Ein flexibles Display erscheint technologisch möglich. Im Projekt soll ein Prototyp realisiert werden, mit dem sich das Funktionsprinzip nachweisen lässt. Die Arbeiten werden vom Europäischen Fonds für Regionale Entwicklung mit einem Budget von 200.000,- € über den Zeitraum von zwei Jahren gefördert.

Abb. 2 Simulierte Intensitätsverteilung der Knotenmode im Wellenleiter a) ohne angelegte Spannung b) bei angelegter Spannung.

Abb. 3a) Messaufbau zur Detektion der lokalen Lichtauskopplung mittels Mikroskop. b) Gemessene Intensität einer Knotenmode.





Laufzeit: 01.07.2015 - 30.09.2018, Projektleiter: Prof. Dr. Dirk Lützenkirchen-Hecht, Budget: 316.000,-€

Supraleitende Hochfrequenzresonatoren aus hochreinem Niob sind für aktuelle und zukünftige Teilchenbeschleuniger wie den Röntgenlaser XFEL oder den ILC unverzichtbar. Allerdings werden die erreichbaren Hochfeldgüten und Feldgradienten durch Oberflächenwiderstand, Quenche und Elektronen-Feldemission begrenzt, die speziell durch Verunreinigungen und Defekte entstehen. Hier sollten daher verschiedene Strategien im Hinblick auf eine mögliche Reduktion der Verlustleistung untersucht werden.

Im Rahmen dieses BMBF-geförderten Projekts wurde einerseits versucht, die parasitäre Feldemission von Resonatormaterialien durch verschiedene Konditionierungsprozesse zu unterdrücken, speziell durch gezielte Wärmebehandlungen, den Beschuss der Metalloberflächen mit beschleunigten Edelgasionen und die Behandlung mit einem intensiven UV-Kurzpulslaser. Andererseits sollten Niob-Materialproben durch Tempern in verdünnten N2-Atmosphären mit Stickstoff dotiert werden. Ziel war es hier, die mit der N-Dotierung verbundenen strukturellen Änderungen in-situ verfolgen zu können und eine Korrelation zu den supraleitenden Eigenschaften herzustellen, mit dem Ziel eines verbesserten Verständnis dieser Prozesse und einer optimierten Prozessführung zur Erhöhung der Güte der Cavities.



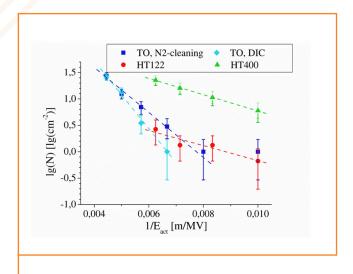
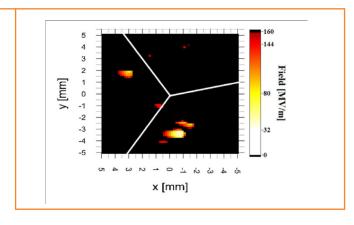


Abb. 1 Anzahl aktivierter Emitter N(E<sub>act</sub>) der thermisch oxidierten Nb Proben nach N₂-Reinigung (■) bzw. nach Trockeneis-Reinigung (DIC, ◆). Zum Vergleich sind die bei Prozessierung bei 122°C gebildeten Proben (HT122,●) und die (nahezu) oxidfreie Oberfläche nach Heizen bei 400°C (HT400, ▲) ebenfalls gezeigt. Die Ausgleichsgeraden sind im Rahmen einer Modellbildung mit einem statistischen Modell entstanden.

Abb. 2 Feldkarte (1 cm²) für einen lokalen Einsatzstrom von 1 nA von einer großkristallinen Nb-Probe nach einer Wärmebehandlung im Vakuum bei 200°C. Die Korngrenzen sind als weiße Linien eingezeichnet. Deutlich sind mehrere Punktförmige Emitter mit Einsatzfeldstärken im Bereich von ca. 40 MV/m auf den Körnern zu identifizieren.



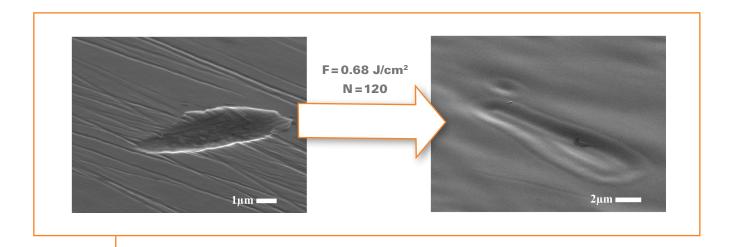


Abb. 3 Rasterelektronenmikroskopische Aufnahmen zum Ausheilen von Polierriefen und einem scharfkantigen Defekt auf einer Nb-Oberfläche durch Exposition mit 120 Laserpulsen einer Fluenz von 0.68 J/cm² (λ= 355 nm, 10 Hz). Durch das Fehlen von scharfen Riefen konnte die Einsatzfeldstärke der Feldemission von typischen Werten mechanisch polierter Nb-Oberflächen von weniger als 200 MV/m auf bis zu 800 MV/m gesteigert werden, d.h. entsprechend behandelte Oberflächen von Beschleuniger-Resonatoren sollten viel höhere Betriebsfeldstärken erlauben.

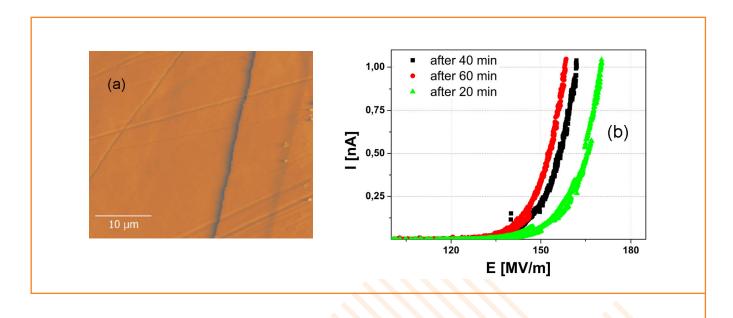


Abb. 4 a) AFM-Aufnahme einer lateral strukturierten lonenstrahlbehandlung einer Nb-Probe durch eine Maske hindurch. Deutlich ist die diagonal durch den Bildausschnitt laufende Grenze zwischen dem bestrahlten (links) und dem unbestrahlten Bereich erkennbar. Ebenso ist zu erkennen, dass sich die feinen Polierriefen mit einer Tiefe von etwa 300 nm mit unveränderter Morphologie durch beide Bereiche ziehen, d.h. der Materialabtrag führt zu keiner nennenswerten Glättung. b) Lokale Strom-Spannungskennlinien im Bereich eines Knotenpunkts mehrerer Korngrenzen für drei verschiedene Bestrahlungsdauern entsprechend einem Abtrag von 60 nm (—), 120 nm (—) und 180 nm (——). Die Einsatzfeldstärke für einen Strom von 1 nA sinkt von ca. 180 MV/m für die unbestrahlte Oberfläche auf ca. 175 MV/m nach 20 Minuten, 160 MV/m nach 40 Minuten und etwa 155 MV/m nach 60 Minuten.

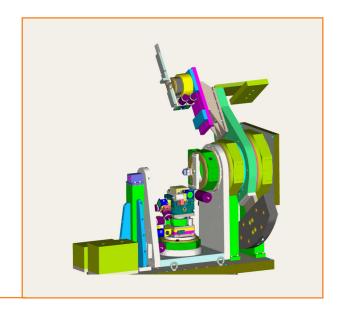
# BMBF-Verbundprojekt: Oberflächensensitive Röntgenabsorptionsspektroskopie mit Zeitauflösung

Laufzeit: 01.07.2019 - 30.06.2022, Projektleiter: Prof. Dr. Dirk Lützenkirchen-Hecht, Budget: 388.000,-€

- In vielen Bereichen werden die physiko-chemischen Eigenschaften von Materialien durch die Struktur und die elementare Zusammensetzung der Oberflächen stark beeinflusst, wenn nicht sogar dominiert. So ist zum Beispiel die Korrosionsbeständigkeit vieler Metalle in wässrigen Medien (Säuren, Laugen) oder aggressiven Gasen auf die Existenz oft nur wenige Nanometer dünner Oxidschichten zurückzuführen, Kratz- oder Verschleißschutzschichten auf Werkzeugen oder Anti-Reflexionsschichten auf optischen Bauteilen (u.a. Solarzellen oder Brillen) werden durch dünne Beschichtungen mit entsprechende Eigenschaften realisiert, und auch in der Mikroelektronik werden durch die zunehmende Miniaturisierung der Schaltkreise die Bedeutung der inneren Grenzflächen immer wichtiger.
- Zur Untersuchung solcher Dünnschichtphänomene stehen eine Reihe von Untersuchungsmethoden zur Verfügung, die allerdings oft nur unter Vakuumbedingungen genutzt werden können, zum Beispiel die Elektronenmikroskopie oder die Photoelektronenspektroskopie, so dass in-situ Untersuchungen in Gasen oder Flüssigkeiten prinzipiell nicht möglich sind. Ebenso sind viele Herstellungsverfahren mit diesen Methoden nicht kompatibel, so dass andere Verfahren eingesetzt werden müssen. Hier setzt das vorliegende Projekt an – zur Untersuchung soll hochenergetische und intensive Röntgenstrahlung aus Speicherringen eingesetzt werden, die an den Oberflächen der Proben gestreut bzw. auch absorbiert wird. Durch die nur geringe Wechselwirkung mit Gasen oder Flüssigkeiten sind so entsprechende in-situ Experimente unter Reaktions- bzw. Herstellungsbedingungen möglich.
- Abb. 1 Schemazeichnung für ein robust aufgebautes Röntgenreflektometer. Kern des geplanten Aufbaus ist eine massiv aufgebaute Schaukel (silbergraue Einfärbung), die die Probe mit ihrer jeweiligen Probenumgebung tragen kann und sich mit sehr hoher Präzision (besser als 0.001°) im Röntgenstrahl positionieren lässt. Ein zweiter Drehkreis (türkisgrün) ist für die Detektoren vorgesehen.



Im hier vorgestellten Projekt soll, zugeschnitten auf die Strahllinie P64 an der PETRA III Synchrotronstrahlungsquelle (DESY, Hamburg) ein Experiment für oberflächensensitive Röntgenabsorptionsspektroskopie bei streifendem Einfall (Grazing incidence EXAFS) und mit Zeitauflösung im Bereich einiger weniger Millisekunden neu aufgebaut werden. Mit solchen Experimenten werden Untersuchungen einer Vielzahl von dynamischen Prozessen an Oberflächen, wie beispielsweise das Wachstum dünner Schichten, chemische Reaktionen an Oberflächen in Gas- oder Flüssigphasen oder auch katalytische Reaktionen mit EXAFS-Spektroskopie auf einer Zeitskala von wenigen Millisekunden möglich. Auf diese Art lassen sich zum Beispiel Schichtwachstumsprozesse quasi Atom für Atom verfolgen, und es wird erwartet, neue Erkenntnisse über solche Wachstumsprozesse zu erhalten.



Essentiell für ein solches Vorhaben ist ein Röntgen-Reflektometer, welches insbesondere den Einsatz von in-situ oder in-operando Zellen, also zum Beispiel Vakuumkammern, nasschemischen Zellen oder auch eines Kryostaten für Tieftemperaturexperimente erlaubt. Um diese Anforderungen alle zu erfüllen und so eine Nutzung für verschiedenartige Experimente zu gestatten, muss das Drehzentrum der Probe im Reflektometer daher einen möglichst großen Abstand von der Basis aufweisen und kompatibel mit Traglasten von mindestens 100 kg sein. Hier soll eine massiv aufgebaute Schaukel den primären Drehkreis für die Probenkammer bilden, während ein zweiter Drehkreis die Ionisationskammern bzw. Pixeldetektoren für die Messung der Reflektivität und einer Referenzprobe tragen soll. Mit der Zielsetzung, vollständige EXAFS-Spektren innerhalb weniger ms messen zu können, müssen für eine zusätzliche Fluoreszenz-Detektion schnelle, großflächige Photodioden zum Einsatz kommen, um die notwendige Zählstatistik für jeden Datenpunkt zu erreichen. Ergänzend sollen Avalanche-Photodioden hinsichtlich ihrer Nutzbarkeit für die vorgeschlagenen Experimente getestet werden. Für die Datenauswertung sollen existierende Programme erweitert und an die neuen Anforderungen angepasst werden, speziell an die großen Datenmengen, die bei zeitaufgelösten EXAFS - Studien anfallen.

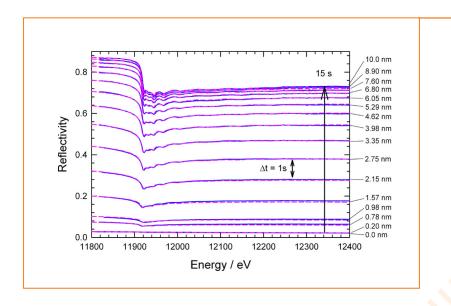
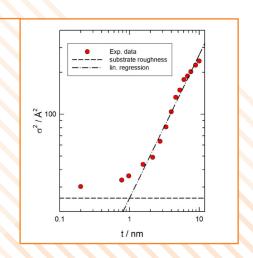


Abb. 2 Beispiel von Röntgenabsorptionsmessungen bei streifendem Einfall während der Herstellung einer Goldschicht durch Kathodenzerstäubung (blaue Kurven). Innerhalb von etwa 15 Sekunden wächst eine 10 nm dicke Schicht. Die experimentellen Daten wurden mit Simulationsrechnungen angepasst, aus denen sich die Dicke und die Rauhigkeit der wachsenden Schicht ergibt (pinke Kurven). Für die Messung eines Einzelspektrums wurden ca. 50 ms benötigt, d.h. während die Schicht um nur eine Atomlage an Dicke zunimmt, konnte ein Spektrum gemessen werden.

Abb. 3 Auswertung einiger selektierter, während des Wachstums einer Goldschicht gemessenen Röntgen-Absorptionsspektren. Aus der Auftragung der quadrierten Rauhigkeit ( $\sigma^2$ ) gegen die Schichtdicke (t) lässt sich das Skalenverhalten während des Wachstums ermitteln, und damit der Wachstumsmodus der Schicht. Für eine Schichtdicke von weniger als 2 nm (ca. 3 s) wachsen kleine, isolierte Cluster auf dem Substrat, für mehr als 3 nm (ca. 5 s) existiert eine zusammenhängende Schicht.



BMBF Verbundprojekt 05H2018 – R&D Beschleuniger (STEnCiL)
In-situ Untersuchungen zur Wechselwirkung von Dotierung und Elektronen-Feldemission bei Nb-Resonatormaterialien

Laufzeit: 01.07.2018 - 30.06.2021, Projektleiter: Prof. Dr. Dirk Lützenkirchen-Hecht, Budget: 311.500,-€

Ziel des beantragten Projekts ist den Effekt der Dotierung von Nb- Materialproben mit Stickstoff und Edelgasen während einer Wärmebehandlung in-situ mittels Röntgenabsorptionsspektroskopischen Methoden (EXAFS/XANES) zu studieren. Die im Rahmen eines Vorgängerprojekts aufgebaute Hochtemperaturzelle soll durch die Integration eines Röhrenofens und einer berührungslosen Temperaturmessung weiter für die Experimente optimiert werden. Ergänzend zu Untersuchungen der Stickstoff-Dotierung soll dann insbesondere die Behandlung in Edelgasatmosphären studiert werden. Die physikalisch-chemischen Veränderungen der Probenoberfläche, insbesondere auch die Aktivierung von Oberflächendefekten, die zu parasitären Feldemissionsprozessen führen, soll detailliert mittels korreliertem Einsatz von optischer Profilometrie, AFM, REM/EDX, XPS und Feldemissionsrastermikroskopie untersucht werden. Anschließen soll untersucht werden, inwieweit eine Deaktivierung der lokalisierten Emitter mittels Ionenbeschuss oder durch Laser-Annealing möglich ist - erste Versuche hierzu haben erfolgversprechende Resultate geliefert.



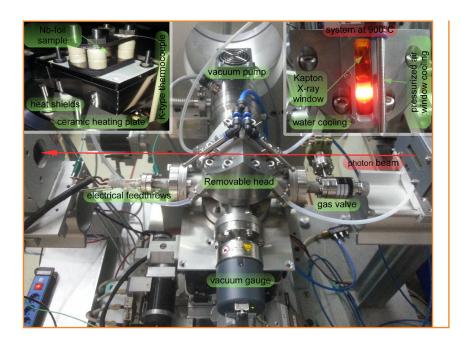


Abb. 1 Prozesskammer für in-situ Röntgenexperimente bei Temperaturen von bis zu 1200 °C unter verdünnten Reaktivgasatmosphären. Die Zelle ist auf Drücke von weniger als 10<sup>-7</sup> mbar evakuierbar, und so kompakt aufgebaut, dass sie in konventionellen Röntgendiffraktometern eingesetzt werden kann. In der Zelle können so die Bedingungen zur Stickstoff-Dotierung von Metallen realisiert werden. Oben links ist das eigentliche Heizelement abgebildet, oben rechts kann man die bei 900 °C hell-glühende Probe durch die gelben Röntgenfenster leuchten sehen.

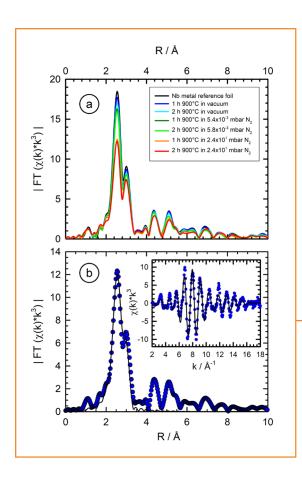
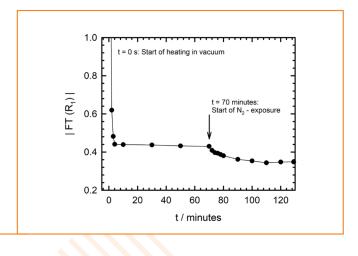


Abb. 2 a) Röntgenabsorptionsmessungen an Nb-Folien nach Wärmebehandlungen unter unterschiedlichen Bedingungen wie angegeben – dargestellt ist die Fourier-Transformierte der Absorptions-Feinstruktur an der Niob K-Kante nach Wiederabkühlung auf Raumtemperatur. Maxima entsprechen Koordinationsschalen um das absorbierende Niob-Atom. Deutlich ist eine Abnahme der Amplitude mit steigender Stickstoff-Begasung zu erkennen. b) Modellierung der Absorptionsdaten der ersten beiden Koordinationsschalen. Fit-Parameter sind die Nb-Nb-Abstände, die mittlere quadratische Verschiebung aus der Gleichgewichtslage und die Anzahl der Nb-Atome in den jeweiligen Koordinationsschalen. Aus den Anpassungen kann auf die geänderte Nahordnungsstruktur während der N-Dotierung geschlossen werden.

Abb. 3 Zeitaufgelöste EXAFS-Messungen während des Prozessierens einer Nb-Folie bei 900 °C. Während des Aufheizens auf 900 °C fällt die Amplitude der ersten Koordinationsschale ab, um sich nach wenigen Minuten nicht mehr zu ändern. Dieses Verhalten ist durch die mit steigenden Temperaturen zunehmenden Amplituden der Gitterschwingungen zu erklären. Nach einer Stunde Heizen bei 900 °C wird Stickstoff zugegeben, was zu einer weiteren Abnahme des Nb-Signals führt.



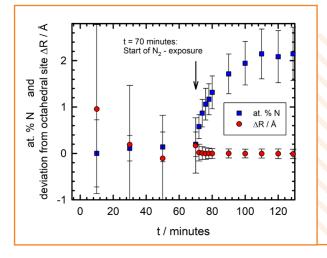


Abb. 4 Modellierung der gemessenen Strukturänderungen als Funktion der Zeit während der Stickstoff-Exposition von Niob bei 900 °C. Dargestellt ist die aus den Absorptionsdaten berechnete Konzentration des im Niob-Gitter gelösten Stickstoffs, und die Abweichung der Position des aufgenommenen Stickstoffs von einer oktaedrischen Lücke im kubisch-raumzentrierten Niob-Gitter. Die Experimente deuten somit darauf hin, dass Niob auf solchen Zwischengitterplätzen eingelagert wird.

# DFG-Projekt: Metall-Oxide TFT Technologieplatform für flexible Schaltkreise in der drahtlosen RF-Kommunikation – Phase 1 & 2 (10by10.com) SPP1796

Laufzeit: Sep. 2015 - Sep. 2021, Projektleiter: Prof. Dr. rer.-nat. Ullrich R. Pfeiffer und Prof. Dr. rer.-nat. Thomas Riedl, Budget Prof. Pfeiffer: 498.252,- €, Budget Prof. Riedl: 551.795,- €

Bei diesem Gemeinschaftsprojekt geht es um die Entwicklung flexibler Elektronik für die Kommunikationstechnik.

Auf dem Forschungsgebiet der flexiblen Dünnschichttransistor-Technologie konnten in den letzten Jahrzehnten enorme Fortschritte erzielt werden. Die Implementierung von biegbaren hochfrequenten Kommunikationssystemen stellt jedoch, insbesondere aufgrund der geringen erreichbaren Transitfrequenz f, der Transistoren, eine besondere Herausforderung dar. Dieses Projekt macht sich zum Ziel, einen Durchbruch in der Realisierung hochfrequenter, drahtloser, biegbarer Kommunikationssysteme herbeizuführen. Dieser Durchbruch wird auf zwei Ebenen angestrebt. Auf der Technologieebene wird eine Metall-Oxid-TFT-Technologie entwickelt und in Bezug auf ihre Hochfrequenzeigenschaften optimiert. Auf der Schaltungsebene werden fortgeschrittene Konzepte basierend auf der Erzeugung von Oberwellen in nichtlinearen Schaltungen oder resistiver Selbstmischung verwendet, um eine Betriebsfrequenz weit über die Transitfrequenz hinaus zu ermöglichen.

■ Die auf Technologieebene angestrebte zehnfache Frequenzverbesserung soll durch Fortschritte in der Metall-Oxid-Dünnschichttransistor-Technologie erfolgen.

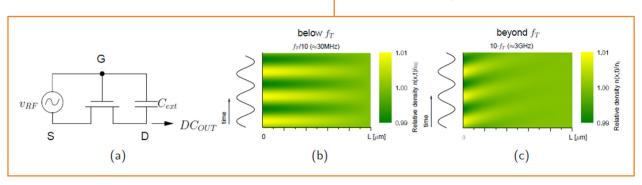
Die andere Verzehnfachung der Transitfrequenz soll durch innovative Schaltungskonzepte realisiert werden.

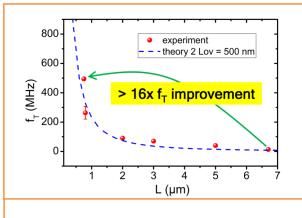


Dazu muss das Schaltverhalten oberhalb der Transitfrequenz  $f_{\rm T}$  in Metall-Oxid basierten FET-Baugruppen verstanden werden, wie sie in diesem Projekt erforscht werden sollen. Es wird das Prinzip der resistiven Selbstmischung des Signals ausgenutzt. Solche Detektorbaugruppen liefern eine quadratische Gleichrichtung des Signals, was einer stromoder spannungsmäßigen Proportionalität der Hochfrequenzeingangsleistung entspricht. Mit Hilfe einer Non-Quasi-Static-Modellierung des Kanals können das Modell und die daraus abgeleiteten Baugruppen optimiert werden.

■ Diese erste Projektphase war durch die wegweisende technologische Optimierung durch die Gruppe von Prof. Riedl geprägt und hat die anfängliche Transitfrequenz f<sub>T</sub> von 30 MHz auf fast 500 MHz mehr als versechzehnfacht. Dies wurde mit einer geänderten Herstellungstechnologie des Bauelements bei reduzierter Kanallänge und reduzierter parasitärer Überlappung unter 500 nm mithilfe eines selbstjustierenden Prozesses der Strukturen möglich.

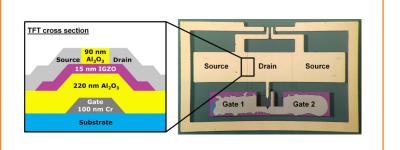
Abb. 1 (a) zeigt eine einfache FET-Detektorgrundstruktur, (b) und (c) zeigen die zeit- und ortsaufgelöste Simulation der Kanalspannung im Gate unterhalb und oberhalb der Transitfrequenz  $f_{\scriptscriptstyle T}$ 





**Abb. 2** Vergleich der Theorie mit der gemessenen Transitfrequenz  $f_{\tau}$  gegenüber der Kanallänge L

■ Seitens der Gruppe von Prof. Pfeiffer wurden Detektorbaugruppen entwickelt, simuliert und nach Fertigung auch vermessen. Der vermessene Detektor zeigte eine Spitzenspannungsempfindlichkeit (RV) von 2 V/W und eine minimale äquivalente Rauschleistung (NEP) von 30 nW / √Hz bei 1 GHz.



#### Abb.3

Differentieller Square law Detektor und cross section des integrierten TFTs

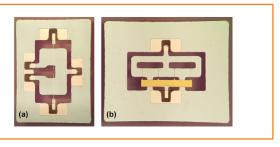
■ Die guten Ergebnisse während der ersten Projektphase haben im Oktober 2018 zu einer weiteren Förderung einer zweiten Phase geführt.

Aufbauend auf den Ergebnissen der ersten Phase sollen die Systeme weiter in ihrer Transitfrequenz  $f_T$  optimiert werden.

#### Abb. 5

Ersatzschaltbild und Mikroskopaufnahme eines Cross-Coupled Oszillators basierend auf IGZO Dünnschichttransistoren mit L=800 nm.

Zunächst soll das Design neuer Transceiver (TRX) -Blöcke untersucht werden. Das Hauptaugenmerk des Lehrstuhls von Prof. Riedl liegt auf der Erhöhung der Ausbeute der TFTs mit geringerer Kanallänge, welches mit einer weiteren Erhöhung der Transitfrequenz  $\mathbf{f}_{\mathsf{T}}$  einhergeht. Es soll hier ein  $\mathbf{f}_{\mathsf{T}} > 1$  GHz erreicht werden.

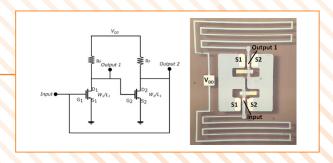


#### Abb. 4

Mikroskopaufnahmen eines optimierten differentiellen Square law Detektors (a) und IGZO TFT mit vier Gate-Fingern (b). Die Kanallänge L beträgt jeweils 800 nm.

Zusätzlich arbeiten die beiden Lehrstühle Hand-in-Hand bei der Optimierung des Gesamtsystems, um insbesondere parasitäre Elemente zu minimieren. Hierzu zählt unter anderem die Design- und Simulationstätigkeit des Lehrstuhls von Prof. Pfeiffer zur Optimierung aller relevanten Eckdaten zur Impedanzanpassung einzelner Elemente. Ohne Impedanzanpassung kann die Leistung nicht verlustfrei an die einzelnen Stufen abgegeben werden und verhindert die maximale mögliche Leistungsabgabe an die Übertragungsstrecke. Auf der Empfangsseite ist ein minimales Grundrauschen wünschenswert, um das Nutzsignal sicher aus dem übertragenen Signal herauszufiltern. Dazu sind viele Teilaspekte zu beachten und zu untersuchen. Auf der Simulationsseite sind dazu Verbesserungen und weitgehende Anpassungen an den einzelnen Modellen der Transistoren notwendig, welche sich in dementsprechenden Anpassungen der Prozessbibliotheken niederschlägt.

Nur so kann durch sukzessive Optimierung das Endziel eines funktionsfähigen Demonstrators am Ende der Projektlaufzeit erreicht werden.



# DFG-Projekt: Invertierte Fulleren-freie organische Solarzellen: Ladungsträgerextraktion und Grenzflächenanalyse

Laufzeit: 01.04.2019 - 31.03.2021, Projektleiter: Prof. Dr. Thomas Riedl, Budget: 154.000,-€

- In den letzten Jahren hat die organische Photovoltaik (OPV) enorme Fortschritte gemacht, da anstelle der bislang üblichen Fullerene neue Fulleren-freie Akzeptormoleküle entwickelt wurden (Abb. 1). Diese führten neben einem Anstieg der Effizienzen zu einer erhöhten thermischen Stabilität der Bauelemente. Die invertierte Zellarchitektur (Abb. 2a) ist hierbei von besonderer Bedeutung, da hocheffizienter Nicht-Fulleren-OSCs im invertierten Layout hergestellt wird. [1]
- Neben der photoaktiven Organik spielen besonders die sogenannten Ladungsträgerextraktionsschichten eine entscheidende Rolle. Für Fulleren-basierte OSCs konnte unser Lehrstuhl in der Vergangenheit bereits weitreichende Einsichten zur Funktionsweise erlangen. [2-4] Ob sich diese Erkenntnisse auf die neuen Fulleren-freien Akzeptoren übertragen lassen, gilt es innerhalb dieses Projekts zu studieren. Im Fokus stehen dabei besonders die als Elektronenextraktionsschicht (engl. electron extraction layer, EEL) genutzten Metalloxide Zinkoxid (ZnO) und Zinnoxid (SnO<sub>x</sub>), da diese im Bauelement ein stark unterschiedliches Verhalten bezüglich Effizienz und Photostabilität aufweisen. [2-4]



Als solches wollen wir in dieser Phase des Projekts zwei zentrale Themen adressieren:

- Elektronenextraktion in Fulleren-freien invertierten OSCs mit Metalloxid-basierten Materialien.
- 2. Photoinduzierte Degradation von Fulleren-freien Solarzellen mit Metalloxid-EELs.
- Für beide Themen wollen wir in Kooperation mit der TU Darmstadt zunächst die energetische Anordnung an der EEL / Akzeptor-Grenzfläche mit Hilfe von Synchrotron-basierter Photoelektronenspektroskopie (PES) aufklären und diese Ergebnisse mit den Eigenschaften von Bauteilen (Solarzellen und dedizierte unipolare Bauteile) korrelieren. Während sich unsere Studie speziell den Fulleren-freien Akzeptoren widmet, werden wir Fullerene als Referenzmaterial nutzen. Dadurch sind wir in der Lage, dedizierte Unterschiede zwischen beiden Akzeptorsystemen aufzudecken und zu verstehen.

Abb. 1
Strukturen typischer Moleküle: (a)
Donor-Polymer, (b) Fulleren- und (c) Fulle-

ren-freier Akzeptor.

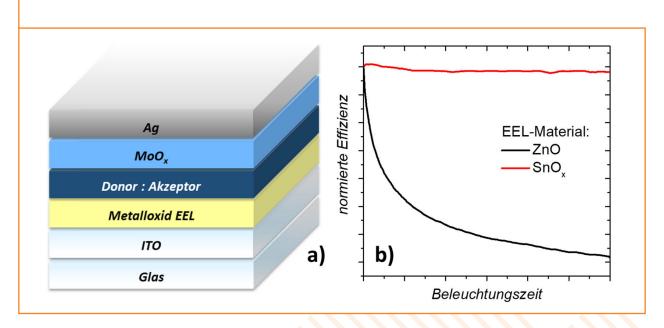
■ Unsere vorläufigen Arbeiten haben beispielsweise gezeigt, dass die Verwendung von SnOx, welches sich in der Vergangenheit als ausgezeichnete EEL für Fulleren-basierte Systeme erwiesen hat, im Vergleich zu ZnO nun wesentlich schlechtere Bauteilcharakteristika zur Folge hat. Die Gründe der schlechteren Bauelementcharakteristika von Fulleren-freien OSCs auf Basis von SnO<sub>x</sub> sollen aufgeklärt und durch geeignete Maßnahmen überwunden werden.

#### Projektpartner:

Dr. Thomas Mayer Technische Universität Darmstadt Materialwissenschaft Fachgebiet Oberflächenforschung

Abb. 2 a) Schichtaufbau einer invertierten OSC mit Metalloxid-EEL. b) Photoinduzierte Degradation einer Solarzelle aus (a) abhängig vom verwendeten EEL-Material.

■ Darüber hinaus haben wir in vorherigen Arbeiten gezeigt, dass die photo-induzierte Degradation in Solarzellen auf Basis von ZnO durch die UV-Spektralkomponenten des Sonnenspektrums ausgelöst wird. Wir konnten diese Degradation darauf zurückführen, dass in ZnO-EELs bei anhaltender UV-Beleuchtung ein Selektivitätsverlust aufgrund von Grenzflächenrekombination auftritt, was sich durch die Verwendung von SnO, anstelle von ZnO vermeiden lässt. [3] Dieses UV-induzierte Degradationsphänomen wird nun ebenfalls in invertierten Fulleren-freien OSCs beobachtet, wobei die Degradation auch hier durch den Einsatz von SnO unterdrückt werden kann, was auf einen Ursprung hinweist, der sich, wie im Fall der Fulleren-basierten Systeme, an der Grenzfläche EEL / Organik befindet. Jedoch gibt es auch Hinweise auf neue Degradationsmechanismen, die für Fulleren-basierte Bauelemente in der Vergangenheit noch nicht beobachtet werden konn-



#### Publikationen:

- [1] L. Meng, Y. Zhang, X. Wan, C. Li, X. Zhang, Y. Wang, X. Ke, Z. Xiao, L. Ding, R. Xia, H.-L. Yip, Y. Cao & Y. Chen: "Organic and solution-processed tandem solar cells with 17.3% efficiency", Science (2018), 361 (6407), 1094-1098, DOI: 10.1126/science.aat2612.
- [2] S. Trost , A. Behrendt , T. Becker , A. Polywka , P. Görrn & Thomas Riedl: "Tin Oxide (SnOx) as Universal "Light-Soaking" Free Electron Extraction Material for Organic Solar Cells", Adv. Energy Mater. (2015), 5, 1500277, DOI: 10.1002/aenm.201500277.
- [3] S. Trost, T. Becker, A. Polywka, P. Görrn, M. F. Oszajca, N. A. Luechinger, D. Rogalla, M. Weidner, P. Reckers, T. Mayer & T. Riedl: "Avoiding Photoinduced Shunts in Organic Solar Cells by the Use of Tin Oxide (SnOx) as Electron Extraction Material Instead of ZnO", Adv. Energy Mater. (2016), 6, 1600347, DOI: 10.1002/aenm.201600347.
- [4] T. Becker, S. Trost, A. Behrendt, I. Shutsko, A. Polywka, P. Görrn, P. Reckers, C. Das, T. Mayer, D. Di Carlo Rasi, K. H. Hendriks, M. M. Wienk, R. A. J. Janssen & T. Riedl: "All-Oxide MoOx/SnOx Charge Recombination Interconnects for Inverted Organic Tandem Solar Cells", Adv. Energy Mater. (2018), 1702533, DOI: 10.1002/aenm.201702533.

# DFG-Projekt: Hybride Tandem-Solarzellen auf Basis von Organometall-Halid Perowskit-Zellen und organischen Solarzellen mit kleiner Energielücke (MUJUPO)

Laufzeit: 06.11.2018 - 31.12.2020, Projektleiter: Prof. Dr. Thomas Riedl, Budget: 165.300,-€

- Tandem-Solarzellen bestehend aus Teil-Zellen mit unterschiedlicher Energielücke erlauben reduzierte Verluste bei der Absorption von hochenergetischem Licht und ebnen somit den Weg hin zu höheren Effizienzen. Das größte Limit für organische Tandemzellen stellt die Teil-Zelle mit großer Energielücke (typischer Weise 1.8 eV) dar. Hier wäre eine hohe Leerlaufspannung bei gleichzeitig hoher externer Quanteneffizienz gefordert, was selbst für die besten bekannten fotoaktiven organischen Systeme mit einer Differenz der Leerlaufspannung (V<sub>oc</sub>) im Vergleich zur elektronischen Energielücke (E<sub>g</sub>/q) von 0.8 1.0 V derzeit nur unzulänglich erfüllt ist.
- Dieses Gemeinschaftsvorhaben hat das Ziel, die Teil-Zelle mit großer Energielücke mit einem Absorber aus der Klasse der Organometall-Halid Perowskite zu realisieren, die sich durch sehr geringe Spannungsverluste auszeichnen, sich aber analog zu den organischen Solarzellen über einfache Flüssigphasenprozesse herstellen lassen. Die Energielücke der Perowskithalbleiter ist über ihre Komposition einstellbar (s. Abb. 1). Zwar wurden für Perowskit-Solarzellen bereits Effizienzen von über 20% berichtet, allerdings bestehen im Zusammenhang mit vielfach verwendeten Systemen, wie z.B. Methylammonium-Blei-lodid (MAPbl<sub>2</sub>), große Bedenken hinsichtlich ihrer Langzeitstabilität. Systeme mit gemischten Kationen (z.B. MA+ und Cs+) und gemischten Halogenidionen (z.B. l- und Br), also MA<sub>1-v</sub>Cs<sub>v</sub>Pb(l<sub>1-v</sub>Br<sub>v</sub>)<sub>3</sub> weisen hingegen eine deutlich bessere Stabilität auf. In aller Regel führt aber sowohl die Zugabe von Cs als auch von Br zu einer Vergrößerung der Bandlücke, was ihrer Verwendung in Tandemzellen im obigen Sinn zu Gute kommt. Für die Teilzelle mit kleiner Energielücke (1.2 - 1.3 eV) sind organische Systeme verfügbar und ausgewählte Materialien werden für dieses Projekt auch von der Gruppe von Prof. Janssen (TU Eindhoven) bereitgestellt.



Bei Projektstart waren keine Tandemzellen auf Basis von MA<sub>1-x</sub>Cs<sub>x</sub>Pb(I<sub>1-y</sub>Br<sub>y</sub>)<sub>3</sub> o.ä. in Kombination mit einer organischen Teil-Zelle mit kleiner Energielücke in der Literatur berichtet. An erster Stelle steht deshalb neben der Etablierung eines robusten Herstellungsprotokolls für diese neuen gemischten Perowskite die genaue Analyse ihrer elektronischen Struktur mittels Photoelektronen-Spektroskopie und die Aufklärung von Energiebarrieren an der Grenzfläche zu angrenzenden Ladungsextraktionsschichten im Vordergrund.

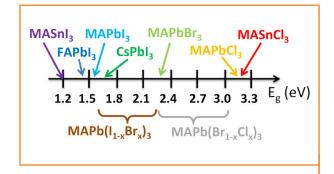


Abb. 1

Einstellung der Bandlücke durch Variation der Perowskit-Komposition

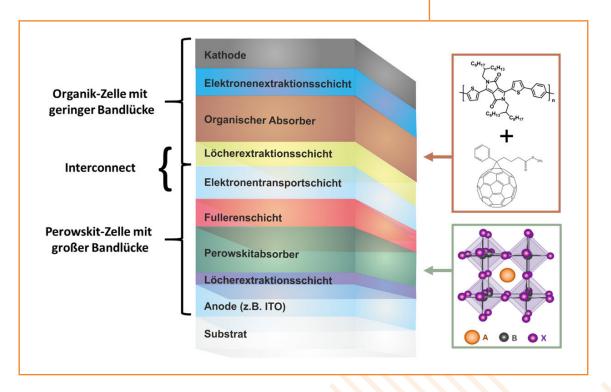
■ Dies ist bislang z.B. für MA<sub>1.x</sub>Cs<sub>x</sub>Pb(I<sub>1.y</sub>Br<sub>y</sub>)<sub>3</sub> und ähnliche Verbindungen nicht hinreichend untersucht, ist aber die Voraussetzung für die Auswahl energetisch optimal angepasster Zwischenschichten, welche nicht nur die Ladungsträgerextraktion verbessern, sondern auch die Stabilität der Zelle erhöhen. Häufig wird in Perowskitsolarzellen bei hohen Temperaturen (>400°C) hergestelltes mikroporöses TiO<sub>2</sub> verwendet. In diesem Projekt werden stattdessen quervernetzbare organische Halbleiter und Metalloxide betrachtet, die bei niederen Temperaturen (<100°C) hergestellt werden können. Diese bilden auch die Materialplattform für die Verbindungsarchitektur monolithisch integrierter Tandemzellen, welche in diesem Vorhaben entworfen und realisiert werden (s. Abb. 2). Wir erwarten dadurch bei niederen Temperaturen (<100°C) herstellbare, langzeitstabile hybride Tandemzellen mit einer Effizienz von > 20%.

#### **Projektpartner:**

Dr. Selina Olthoff Universität zu Köln Department für Chemie Institut für Physikalische Chemie

#### Abb. 2

Beispielhafter Schichtaufbau einer Perowskit-Organik Hybrid-Tandemsolarzelle



#### Publikationen:

- [1] K. O. Brinkmann, J. Zhao, N. Pourdavoud, T. Becker, T. Hu, S. Olthof, K. Meerholz, L. Hoffmann, T. Gahlmann, R. Heiderhoff, M. F. Oszajca, N. A. Luechinger, D. Rogalla, Y. Chen, B. Cheng & T. Riedl: "Suppressed decomposition of organometal halide perovskites by impermeable electron-extraction layers in inverted solar cells", Nature Communications (2017), 8, 13938, DOI: 10.1038/ncomms13938.
- [2] T. Hu, T. Becker, N. Pourdavoud, J. Zhao, K. O. Brinkmann, R. Heiderhoff, T. Gahlmann, Z. Huang, S. Olthof, K. Meerholz, D. Többens, B. Cheng, Y. Chen & T. Riedl: "Indium-Free Perovskite Solar Cells Enabled by Impermeable Tin-Oxide Electron Extraction Layers", Adv. Mater. (2017), 29, 1606656, DOI: 10.1002/adma.201606656.
- [3] J. Zhao, K. O. Brinkmann, T. Hu, N. Pourdavoud, T. Becker, T. Gahlmann, R. Heiderhoff, A. Polywka, P. Görrn, Y. Chen, B. Cheng & T. Riedl: "Self-Encapsulating Thermostable and Air-Resilient Semitransparent Perovskite Solar Cells", Adv. Energy Mater. (2017), 7, 1602599, DOI: 10.1002/aenm.201602599.
- [4] T. Becker, S. Trost, A. Behrendt, I. Shutsko, A. Polywka, P. Görrn, P. Reckers, C. Das, T. Mayer, D. Di Carlo Rasi, K. H. Hendriks, M. M. Wienk, R. A. J. Janssen & T. Riedl: "All-Oxide MoOx/SnOx Charge Recombination Interconnects for Inverted Organic Tandem Solar Cells", Adv. Energy Mater. (2018), 1702533, DOI: 10.1002/aenm.201702533.
- [5] D. Di Carlo Rasi, P. M. J. G. van Thiel, H. Bin, K. H. Hendriks, G. H. L. Heintges, M. M. Wienk, T. Becker, Y. Li, T. Riedl & R. A. J. Janssen: "Solution-Processed Tin Oxide-PEDOT:PSS Interconnecting Layers for Efficient Inverted and Conventional Tandem Polymer Solar Cells", Sol. RRL (2019), 3, 1800366, DOI: 10.1002/solr.201800366
- [6] S. Olthof and T. Riedl: "Metal-Oxide Interface Materials for Organic and Perovskite Solar Cells", In: World Scientific Reference of Hybrid Materials, Volume 2: Devices from Hybrid and Organic Materials, World Scientific (2019), p. 81-104, DOI: 10.1142/9789813270541\_0003.

EFRE Projekt: PerovsKET – Verbesserung der Mikrostruktur von Perowskiten mittels thermischem Nanoimprint als Schlüsseltechnologie für großflächige Perowskit-Optoelektronik

Laufzeit: 01.05.2019-30.04.2022, Projektleiter: Prof. Dr. Thom as Riedl, Budget: 544.000 €

- Die Geburtsstunde der Mikroelektronik Anfang der 1970'er Jahre war der Ausgangspunkt eines Paradigmenwechsels, der bis heute unseren Alltag in vielerlei Aspekten grundlegend prägt. Die moderne Informationsgesellschaft, die vielzitierte Digitalisierung des privaten und öffentlichen Lebens wären ohne die Mikroelektronik undenkbar. Träger von Information in der Mikroelektronik sind geladene Teilchen, die sog. Elektronen. Die über Jahrzehnte hinweg fortschreitende Verbesserung der Mikroelektronik durch Miniaturisierung steht heute kurz davor, ihre physikalischen Grenzen zu erreichen - der Fortschritt gerät ins Stocken. Eine Revolution mit ähnlicher Tragweite wie die Einführung der Mikroelektronik könnten in Zukunft photonische Schaltkreise auslösen. Hier sind Träger der Information Lichtteilchen, sog. Photonen. Die Kombination elektronischer und photonischer Schaltungen auf einem Mikrochip (integrierte Optoelektronik) stellt Funktionalitäten in Aussicht, die alles bislang Bekannte im Hinblick auf Geschwindigkeit und Effizienz in den Schatten zu stellen vermögen. Neben der Informations-/ und Kommunikationstechnik finden sich vielfältige Anwendungsmöglichkeiten im Bereich der Sensorik bis hin zu sogenannten Lab-on-Chip Lösungen.
- Der integrierten Optoelektronik fehlt allerdings die zentrale Komponente: eine geeignete (Laser-) Lichtquelle, die sich in Siliziumchips integrieren lässt. Vor Kurzem haben neue Halbleiter aus einer Materialklasse, die man als Mineralien seit dem 19. Jahrhundert kennt, die Bühne der Optoelektronik betreten und für Furore in der Wissenschaft gesorgt die Perowskite. Was macht Perowskit-Laser so besonders? Sie können aus einer Lösung prozessiert werden und haben in ersten sehr vielversprechenden Pionierarbeiten ihr großes Potenzial für die Integration in die Silizium-Elektronik gezeigt.



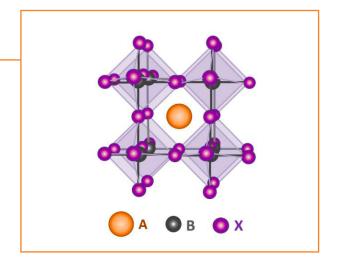


Dieses Vorhaben wurde aus Mitteln des Europäischen Fonds für regionale Entwicklung (EFRE) gefördert.

Als wichtige Vorarbeit wurde in Kooperation des Lehrstuhls für Elektronische Bauelemente (Leitung: Prof. Riedl) und der Arbeitsgruppe Mikrostrukturtechnik (Leitung Prof. Scheer) ein neuartiger Herstellungsprozess für besonders defektarme Perowskitschichten entwickelt. Dabei werden die aus einer Lösung aufgebrachten Perowskitschichten mittels eines thermischen Imprintverfahrens rekristallisiert. Dabei werden die anfangs sehr rauen und Defekt-reichen Perowskitschichten unter gleichzeitiger Anwendung von Temperatur (< 150°C) und Druck (ca. 100 bar) rekristallisiert und geglättet. Dadurch werden nicht nur optische Verluste durch Lichtstreuung reduziert, sondern es werden auch Strukturdefekte im Perowskit-Halbleiter beseitigt, die Lasertätigkeit erschweren oder unmöglich machen. Auch eine Strukturierung der Perowskitschichten mit photonischen Resonatorstrukturen, die für einen Laser benötigt werden, wird dadurch möglich. Ein derartiges Strukturierungsverfahren bei niedrigen Temperaturen um 100°C wäre für etablierte Halbleiter völlig aussichtslos und wird einzig durch die spezifischen Kristalleigenschaften der Perowskite ermöglicht.

■ Das Projekt PerovsKET hat das Ziel, die entwickelte Prozesstechnik besser zu verstehen und das bisher noch in den Perowskiten enthaltene Blei durch andere Metalle zu ersetzen. Der Projektpartner NB Technologies bringt ein patentiertes Nanoimprint-Verfahren mit innovativen Stempeln in das Projekt ein, das die Hochskalierung des Prozesses ermöglichen soll und damit den Grundstein für eine spätere Serienfertigung legt. Die AMO GmbH wendet innovative Strukturierungsverfahren an, um die verbesserten Perowskitmaterialien in Silizium-basierte Chipsysteme zu integrieren. Die nano-photonischen Bauelemente sollen eine wesentlich verbesserte Leistungsfähigkeit demonstrieren und Rekordwerte auch auf größeren aktiven Flächen als bisher erreichen. Idealerweise leisten unsere Arbeiten auch einen wesentlichen Beitrag im globalen Rennen um die erste Perowskitlaserdiode. Das übergeordnete Ziel bleibt aber die integrierte Optoelektronik, um das Beste aus der Welt der Elektronik und der Photonik zu vereinen.

Abb. 1
ABX<sub>3</sub> Perowskitkristallstruktur



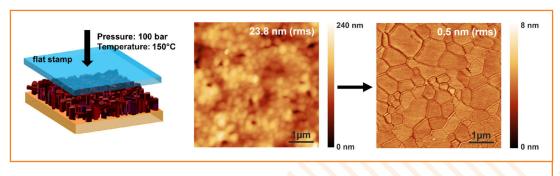


Abb.

Prinzip der Rekristallisation einer Perowskitschicht mittels thermischem Imprint. (Bild eher zweispaltig) DFG-Projekt: Grundlagenuntersuchungen zum Wachstum ultradünner Metallfilme mittels plasmaunterstützter, räumlich sequenzieller Atomlagenabscheidung bei Atmosphärendruck

Laufzeit: 01.01.2019 - 31.12.2021, Projektleiter: Prof. Dr. Thomas Riedl, Budget: 303.000,-€

- Ultradünne Metallschichten bieten eine einzigartige Kombination an elektrischen, optischen und plasmonischen Eigenschaften, die zahlreiche Anwendungen wie beispielsweise semitransparente Metallelektroden für optoelektronische Dünnschichtbauelemente ermöglichen. Nachteilig ist, dass dünne Metallschichten auf vielen Substraten zu Inselwachstum neigen. Unterhalb der Perkolationsschwelle, an der diese Inseln zusammenwachsen, ist die elektrische Leitfähigkeit daher verschwindend gering, und sie steigt mit dem Erreichen der Perkolationsschwelle um mehrere Größenordnungen an. Typische Perkolationsschwellen für aufgedampfte oder gesputterte Metallschichten wie Silber oder Gold liegen bei Schichtdicken im Bereich von 10 bis 15 nm. Die Verbesserung und Steuerung des Benetzungsverhaltens von Metallschichten zur Reduzierung der Perkolationsschwelle ist daher ein zentrales Mittel zur Realisierung semitransparenter Metallelektroden.
- Ultradünne Metallschichten werden heute überwiegend mittels Sputtern oder thermischem Verdampfen hergestellt. Die Atomlagenabscheidung (engl. Atomic Layer Deposition, ALD) von Metallen wie Silber oder Kupfer befindet sich hingegen noch in den Kinderschuhen. Grundsätzlich ermöglicht die ALD eine Schichtdickenkontrolle bis hinunter zu einer einzelnen atomaren Lage, ein homogenes Wachstum über große Flächen und ein konformes Wachstum auf Strukturen mit hohem Aspektverhältnis. Die ALD ist heute ein etabliertes Verfahren zur Abscheidung von Metalloxiden. Plasmaunterstützte ALD ermöglicht darüber hinaus geringere Prozesstemperaturen und auch den Zugang zu nichtoxydischen Materialien wie etwa Nitriden und Metallen. Im Gegensatz zu konventioneller, vakuumbasierter ALD steht bei der hier im Fokus stehenden räumlich sequenziellen ALD (auch spatial ALD) auch eine spätere kontinuierliche Rolle-zu-Rolle-Abscheidung in Aussicht.



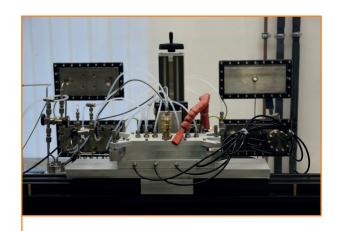


Abb. 1 Atmosphärendruck-Plasma- ALD- Anlage

■ Das zentrale Ziel dieses Projektes ist die Erforschung der plasmaunterstützten räumlich sequenziellen ALD perkolierter, ultradünner Metallschichten bei Atmosphärendruck mit hoher elektrischer Leitfähigkeit und gleichzeitig hoher optischer Transparenz. Es werden Prozesstemperaturen unterhalb von 120 °C angestrebt. Der Kern der Arbeiten an der Bergischen Universität Wuppertal sind Untersuchungen der frühen Phasen der Nukleation und Schichtbildung in Abhängigkeit von den Prozessparametern und den jeweiligen neuen Präkursoren sowie die Evaluierung von Oberflächenfunktionalisierungen, beispielsweise mit organischen Gruppen oder nicht-oxydischen anorganischen Filmen mit dem Ziel einer möglichst frühen Perkolation. Darüber hinaus soll das Einbringen organischer Moleküle mittels Moleküllagenabscheidung in die wachsenden Metallschichten untersucht werden. Dadurch soll das Inselwachstum unterdrückt und gleichzeitig eine frühe Perkolation und somit eine möglichst hohe elektrische Leitfähigkeit auch bei sehr dünnen Metallschichten erreicht werden.

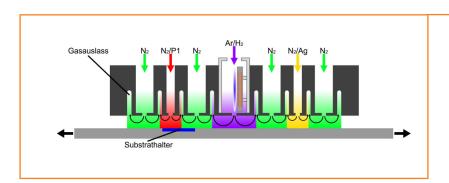


Abb. 2 Prinzip der Atmosphärendruck-Plasma-ALD. Die zu beschichtenden Substrate werden nacheinander an verschiedenen Reaktionszonen vorbei bewegt.

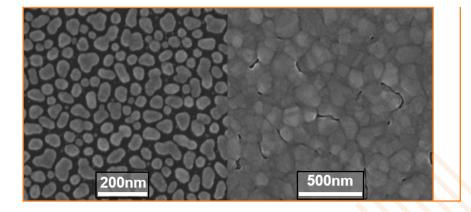


Abb. 3 Abbildungen einer nichtperkolierten und nichtleitenden, Silberschicht (links) und einer perkolierten leitenden Silberschicht (rechts) aufgenommen in einem Rasterelektronenmikroskop.

■ Die Arbeiten in diesem von der DFG gefördertem Kooperationsprojekt werden zusammen mit Prof. Dr. Anjana Devi an der Ruhr-Universität Bochum und ihrer Gruppe durchgeführt. Dort liegt der Schwerpunkt auf der Entwicklung neuer thermisch stabiler Silber- und Kupferpräkursoren mit hohem Dampfdruck und hoher Reaktivität gegenüber reduzierenden Plasmen bei niedrigen Temperaturen.

Laufzeit: 01.10.2018 - 31.03.2020, Projektleiter: Prof. Dr. Thomas Riedl, Budget: 181.000,-€

Im Vergleich zu Silizium zeichnen sich Nitrid-Halbleitermaterialien, wie z. B. Galliumnitrid (GaN) und Aluminiumnitrid (AIN) sowie deren ternäre Verbindungen wie AlGaN, durch eine hohe Elektronenbeweglichkeit und Durchbruchspannung sowie eine große direkte Bandlücke aus. Solche Nitridhalbleiter spielen eine wesentliche Rolle in energieeffizienten Leuchtdioden, Konvertern für Solar- und Windkraftanlagen, Wechselrichtern im Bereich der Elektromobilität, Hochfreguenzanwendungen für Mobilfunknetze und als Hardware für Sensorik und sensorische Anwendungen. Schaltkreise auf der Basis von Nitridhalbleitern tragen so wesentlich zur Ressourcenschonung bei und sind essentiell z.B. für die Bereitstellung der Infrastruktur eines flächendeckenden Internet of Things.

Ein wesentlicher Prozessschritt bei der Fertigung solcher Nitridhalbleiter-Bauelemente sind Trockenätzprozesse. Ein sehr neues und vielversprechendes Trockenätzverfahren ist das Atomlagenätzen (engl. Atomic Layer Etching, ALE), das besonders große Homogenität, Kontrolle der Ätztiefe bis in den Bereich einer einzelnen Atomlage und eine sehr geringe Schädigungsarmut verspricht. ALE steht in Analogie zu der inzwischen weit verbreiteten Atomlagenabscheidung (engl. Atomic Layer Deposition, ALD). In Analogie zur ALD erfolgt auch bei der ALE der Ätzvorgang in selbstlimitierenden, sich zyklisch wiederholenden Prozessschritten (siehe Abbildung). Durch den selbstlimitierenden Charakter der Prozessschritte wird in jedem ALE-Zyklus dieselbe Menge an Material abgetragen. Die zyklische Wiederholung dieser Schritte ermöglicht dann eine kontrollierte, sehr präzise Einstellung der Ätztiefe.

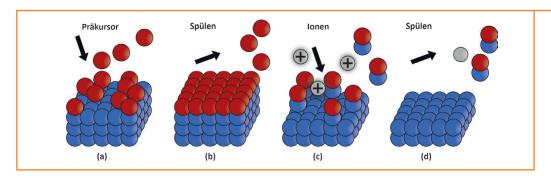
Gefördert durch:



aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages



Abb 1 Schematische Darstellung eines ALE-Zyklus: Im ersten Schritt (a) reagiert ein Präkursor (rot), der die Bindungen der obersten Atomlage zu den darunterliegenden schwächt, mit der Substratoberfläche. Der zweite Prozessschritt (b) ist ein Spülvorgang. Im dritten Schritt (c) erfolgt das Entfernen der zuvor modifizierten, obersten Atomlage zum Beispiel durch Beschuss mit Ar-lonen (grau) aus einem Plasma. Im vierten und letzten Schritt (d) erfolgt ein erneuter Spülvorgang.



- Dieses Projekt hat das Ziel, neue schädigungsarme und homogene ALE-Prozesse für Oxid- und Nitridhalbleiter zu entwickeln. Während bisherige ALE-Prozesse auf Basis einer Chlor- oder Fluorchemie entwickelt wurden, fokussiert sich der Lehrstuhl für Elektronische Bauelemente in seinen Projektarbeiten auf eine völlig neue Ätzchemie. Ziel ist eine verstärkte Nachhaltigkeit der Prozessführung. Dazu soll auf Prozesstoffe, die eine hohe Gefährdung der Umwelt und der Arbeitsplatzsicherheit darstellen (z. B. Chlor und Flusssäure), verzichtet werden. Ein erster Arbeitsansatz hierzu ist ein Prozess, bei dem die Nitridoberfläche zunächst oxidiert wird, dann durch einen organischen Komplexbildner eine modifizierte, schwach gebundene Schicht an der oxidierten Oberfläche erzeugt wird, die schließlich durch ein Plasma abgetragen wird.
- Um dieses Ziel zu erreichen, werden zunächst ALE-Prozesse mit Komplexbildnern für halbleitende Metalloxide, die in eigenen Laboren hergestellt werden können, wie etwa Zinkoxid (ZnO) entwickelt. In weiteren Schritten sollen diese Prozesse dann auf Ga₂O₃ und schließlich auf GaN übertragen werden. Ebenso soll untersucht werden, in wie weit sich die entwickelten ALE-Prozesse eignen, um so geätzte Dünnschichten in elektronischen Bauelementen zu verwenden. Dafür eignen sich beispielsweise an der BUW hergestellte Organische- oder Perovskite-Solarzellen, welche eine mittels ALD abgeschiedene Ladungsträgerextraktionsschicht beinhalten.
- Die ALE ist bisher primär ein Vakuumverfahren. Hervorzuheben ist daher, dass die in diesem Projekt entwickelten ALE-Verfahren perspektivisch auch bei Atmosphärendruck und als kontinuierlichen Rolle-zu-Rolle- oder Sheet-to-Sheet-Verfahren (spatial ALE) weiterentwickelt werden sollen, um die Verfahren in Richtung zu höherem Durchsatz und niedrigeren Kosten zu optimieren. Die Arbeiten in diesem ZIM-Kooperationsprojekt werden zusammen mit der Firma SENTECH Instruments (Berlin) durchgeführt.

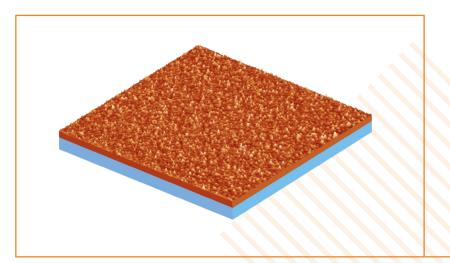
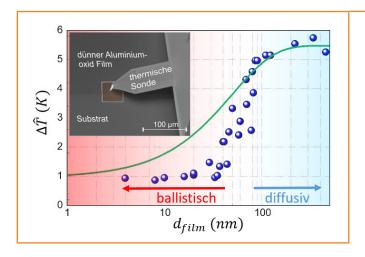


Abb. 2 Glättungseffekt durch ALE: Topografie einer polykristallinen ZnO-Oberfläche nach 20 ALE-Ätzzyklen aufgenommen mit einem Rasterkraftmikroskop. Die mit ALE geätzte ZnO-Oberfläche zeigt eine gegenüber dem Ausgangswert um ca. 50% verringerte RMS-Rauigkeit von 1,2 nm.

Laufzeit: 01.10.2018 - 30.9.2021, Projektleiter: Dr. Ralf Heiderhoff, Budget: 300.000,-€



- Dünne Schichten gewinnen in einer Vielzahl von technischen Anwendungen immer mehr an Bedeutung. Da die thermischen Eigenschaften dieser dünnen Schichten zu den grundlegenden Funktionen zahlreicher technischer Komponenten beitragen, sind sie für deren effizienten Betrieb und ihre Zuverlässigkeit von besonders hohem Interesse. Vor allem haben Wärmeleitfähigkeitsmessungen in den letzten Jahren große Aufmerksamkeit gewonnen, da die Bauelementbetriebstemperatur sowohl die Lebensdauer als auch das elektrische Verhalten beeinflusst. Allerdings sind die häufig verwendeten Techniken zur Wärmeleitfähigkeitsmessung entweder in ihrer räumlichen Auflösung oder in der Möglichkeit der gerichteten Analyse des Wärmetransports begrenzt. Die Wärmeleitfähigkeit wird nur als eine skalare Größe in Untersuchungen des Wärmestroms durch eine Schicht und in Wärmetransportuntersuchungen in der Ebene angesehen. Der Wärmetransport kann jedoch sowohl anisotrop sein als auch nichtlineare Beiträge an Grenzflächen besitzen.
- Im Rahmen der ersten Phase dieses Projektes konnte bereits erfolgreich demonstriert werden, dass mit Hilfe eines thermischen Nahfeld-Mikroskopes Untersuchungen des anisotropen thermischen Transportes senkrecht zur Schicht und innerhalb ultradünner Filme erfolgreich durchgeführt werden können. Wärmetransportcharakteristika, die bisher nur über Simulationen zugänglich waren, wurden erstmalig experimentell erfasst. Abweichend von der üblichen makroskopischen diffusiven Beschreibung wurde der Beitrag ballistischer Transportmechanismen bereits bei Filmdicken, die deutlich größer als die mittleren freien Phononen-Weglängen sind, aufgezeigt (siehe Abb. 1).
- In der bewilligten zweiten Projektphase sollen statische und dynamische thermische Transporteigenschaften in Abhängigkeit der Temperatur von amorphen und polykristallinen Schichten quantitativ mit höchster räumlicher Auflösung studiert werden. Als Demonstratoren dienen zum einen dünne Filme von Blei-Halid-Perowskiten.



**Abb. 1** Vergleich der gemessenen und für diffusiven Transport berechneten Temperaturoszillationänderung  $\Delta \hat{\Gamma}$  der Wärmesonde in Abhängigkeit der  $Al_2O_3$  Filmdicke.

■ Neben ihrer großen Relevanz für Anwendungen in Solarzellen, LEDs und LASERn, erlauben Perowskithalbleiter durch geeignete Wahl ihrer Kationen und Halogene einen modellhaften Zugang zu der thermischen Leitfähigkeit in Abhängigkeit der Kristallstruktur, der Dimensionalität und der Kristallorientierung (siehe Abb. 2). Ebenso sind Wärmetransportuntersuchungen an Korngrenzen zugänglich. Zum anderen ebenen Schichtstrukturen, die mittels Atomlagendeposition hergestellt wurden, den Zugang zu den gerichteten Wärmetransportmechanismen an Grenzflächen von Vielschichtsystemen und an den Übergängen von zweidimensionalen zu dreidimensionalen Wärmeleitungen. Dadurch werden neue und innovative Perspektiven für Schadensanalysen und Zuverlässigkeitsuntersuchungen von zukünftigen Dünnschichtbauelementen erschlossen. Es können existierende thermophysikalische Denkmodelle von Nanosystemen durch Messungen erforscht und quantitativ überprüft werden. Grenzen der klassischen Wärmeleitungsgesetze in Strukturen reduzierter Dimension werden aufgezeigt.

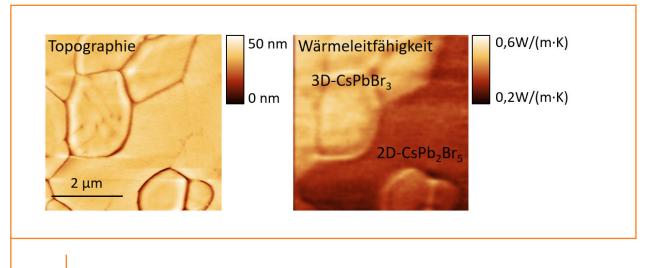


Abb. 2 Lokale Detektion der Wärmeleitfähigkeit von Cs<sub>x</sub>Pb<sub>y</sub>Br<sub>z</sub> Einkristallen mit höchster Ortsauflösung.

### Ausgewählte Publikationen zum Projekt

1. Haeger T., Wilmes M., Heiderhoff R., and Riedl T.: "Simultaneous Mapping of Thermal Conductivity, Thermal Diffusivity, and Volumetric Heat Capacity of Halide Perovskite Thin Films: A Novel Nanoscopic Thermal Measurement Technique", J. Phys Chem. Lett. (2019), 10, 3019–3023, DOI: 10.1021/acs.jpclett.9b01053

Z.Heiderhoff R., Haeger T., Pourdavoud N., Hu T., Al-Khafaji M., Mayer A., Chen Y., Scheer H.-C., Riedl T.: "Thermal Conductivity of Methylammonium Lead Halide Perovskite Single Crystals and Thin Films – A Comparative Study" The Journal of Physical Chemistry C (2017), DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b11495

3. Heiderhoff R., Haeger T., Dawada K., and Riedl T.: "From diffusive in-plane to ballistic out-of-plane heat transport in thin non-crystalline films", Microelectronics Reliability,76-77 (2017), 222-226, DOI: 10.1016/j.microel.2017.06.0644.

4. Haeger T., Heiderhoff R., and Riedl T.: "From diffusive to ballistic Stefan-Boltzmann heat transport in thin non-crystalline films" RSC Advances (2016), 6, 94193-94199, DOI: 10.1039/c6ra20407d

DFG-Projekt: Graphene-basierende, zweidimensionale poröse und ionische Polymernetzwerke und Kohlenstoff-Nanosheets für die Anwendung in Superkondensatoren

Laufzeit: Dezember 2017 - Dezember 2020, Projektleiter: Prof. Dr. Ullrich Scherf, Budget: 219.400,-€

- Initiiert durch das CSC (China Scholarship Council)-finanzierte Promotionsprojekt von Kai Yuan/Nanchang University, VR China (2013-2017), hat sich in den Jahren nach 2013 eine sehr fruchtbare Zusammenarbeit zwischen der Arbeitsgruppe um Prof. Yiwang Chen/Jiangxi Provincial Key Laboratory of New Energy Chemistry an der Nanchang University/China und unserer Arbeitsgruppe Makromolekulare Chemie an der BUW (buwmakro, Leitung: Prof. Ullrich Scherf) kontinuierlich entwickelt. Ziel der Zusammenarbeit ist die Entwicklung leistungsfähiger, Kohlenstoff-basierter Hybridmaterialien für sogenannte Superkondensatoren ("supercapacitors") und für Elektrokatalysatoren, u.a. zur Wasserspaltung.
- DEG Deutsche Forschungsgemeinschaft

- Nach dem erfolgreichen Abschluss der Dissertation (mit dem Prädikart summa cum laude) ist Dr. Kai Yuan als Nachwuchs-Wissenschaftler an seine Heimatuniversität nach Nanchang zurückgekehrt.
- Die im Rahmen des Promotionsprojektes erzielten gemeinsamen Resultate flossen in eine Reihe hochkarätiger Publikationen ein (u.a. in Angew. Chem. Inter. Ed., Adv. Mater., Chem. Mater., ChemElectroChem, Mater. Chem. Front.), und bildeten eine sehr fundierte und solide Grundlage, um im Rahmen der sehr kompetitiven gemeinsamen Ausschreibung zwischen NSFC (National Science Foundation China) und DFG im Jahr 2017 die Förderung für ein gemeinsames Kooperationsprojekt zu Polymer-basierten, ionischen und mikroporösen Hybridmaterialien einzuwerben. Auf Wuppertaler Seite arbeiten ein DFG-finanzierter Doktorand (Dario Wetterling) sowie ein weiterer CSC-finanzierter, von Prof. Ullrich Scherf und Prof. Thomas Riedl, beide Wuppertal Center of Smart Materials and Systems, gemeinsam betreuter chinesischer Doktorand (Yazhou Xu) im Projekt und beschäftigen sich mit der Synthese von mikroporösen Polymernetzwerken mit quartären Ammoniumzentren (vom N-Phenylacridinium-Typ, Dario Wetterling) bzw. mit der Entwicklung von geeigneten Prozeduren zur Abscheidung von mikroporösen Polymerfilmen aus sogenannten COFs (covalent organic frameworks) für eine spätere Infiltration mit aktiven, Perovskit-basierten Halbleiterkomponenten (Yazhou Xu, in Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe Elektronische Bauelemente um Prof. Thomas Riedl/Wuppertal Center of Smart Materials and Systems).

Im Rahmen des Kooperationsprojektes ist ein intensiver Austausch von Gastwissenschaftlern vorgesehen: Dario Wetterling hat sich dabei im April/Mai 2019 in Nanchang aufgehalten, um erste Anwendungsexperimente mit seinen Polymermaterialien zu planen und durchzuführen. Während der Vorarbeiten in Wuppertal ist es gelungen, eine neuartige Synthesemethodologie für ionische Polymere und Polymernetzwerke zu entwickeln, bestehend aus einer Polymer-bildenden Kohlenstoff-Stickstoff (CN)-Kupplung nach Buchwald/Hartwig und einer anschließenden, polymeranalogen Cyclisierung nach Friedel/Crafts unter Ausbildung der avisierten Zielstrukturen.

Abb. 1 Aufbauprinzip Kohlenstoff-basierter, ionischer Hybridmaterialien für Superkondensatoren

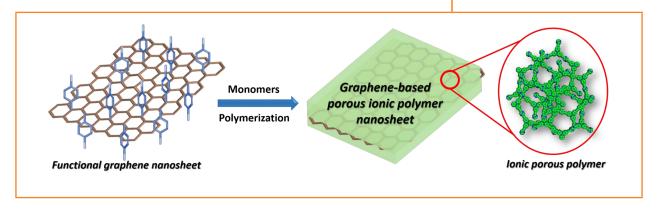




Abb 2 Superkondensator-Bauelement (gefertigt in der Gruppe um Prof. Yiwang Chen, Nanchang University, China)

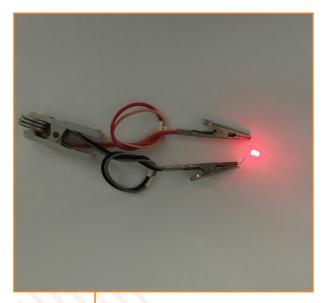


Abb. 3 Superkondensator-Bauelement als Energiequelle für eine rote LED (gefertigt in der Gruppe um Prof. Yiwang Chen, Nanchang University, China)

### Projektverantwortliche:

Prof. Ullrich Scherf

Makromolekulare Chemie (buwmakro) und Institut
für Polymertechnologie (IfP)

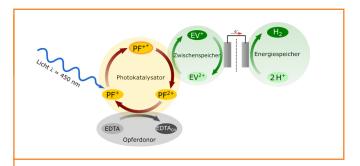
Prof. Yiwang Chen
College of Chemistry/Institute of Polymers,
Jiangxi Provincial Key Laboratory of New Energy Chemistry,
Nanchang University, 999 Xuefu Avenue,
Nanchang 330031, China

Laufzeit: 01.11.2017 - 31.10.2020, Projektleiter: Prof. Dr. Michael W. Tausch: 204.400,- €

Dieses Folgeprojekt des DFG-Projekts (TA 228/4-1) Photo-LeNa hat als Hauptziel die Qualitätssteigerung der Lehre in Chemie und den benachbarten MINT-Fächern durch curriculare Innovation. Der in Photo-MINT angestrebte fachliche und didaktische Mehrwert für die Lehre fokussiert als Leitmotiv den elektronisch angeregten Zustand A\* von Molekülen und anderen Teilchenverbänden, der "das Herz aller Photoprozesse" ist und de facto ein "Elektronenisomer des Grundzustands" darstellt (N. J. Turro). Die möglichen Wege für seine Erzeugung und Desaktivierung sollen aus didaktischer Perspektive erschlossen und strukturiert, d.h. mit Experimenten, Konzepten, Print- und Elektronikmaterialien für Unterricht und Lehre ausgestattet werden. Anschließend an Photo-LeNa sollen in Photo-MINT weitere Begriffe und Konzepte der Chemie nachjustiert und interdisziplinäre Brücken zwischen der Chemie und anderen Schul- und Studienfächern erschlossen werden. Darunter werden jene Fächer ausgewählt, in denen Photoprozesse ebenfalls Schlüsselfunktionen in wichtigen Inhaltsfeldern des betreffenden Faches einnehmen. Dies sind die MINT-Fächer Physik, Biologie und Informatik sowie das Fach Geographie. Aus didaktischer Sicht ist es für jedes dieser Fächer gewinnbringend, wenn die für das jeweilige Fach relevanten stofflichen und energetischen Phänomene bei der Wechselwirkung Licht-Materie auf die Elementarprozesse bei und nach der Interaktion von Photonen mit Molekülen (oder anderen Teilchenverbänden) zurückgeführt werden, also auf diskrete Einheiten, wie sie für die chemische Betrachtungsweise charakteristisch sind. Insofern erhält die Chemie der angeregten Zustände bei der Erschließung und curricularen Integration von Photoprozessen in die Lehrgänge anderer MINT-Fächer eine wegweisende Funktion.



■ Im Brennpunkt von Photo-MINT steht science for future. Sie klärt auf, erforscht und entwickelt Lösungen für jene Forderungen, für die junge Menschen an den fridays for future im Jahr 2019 demonstrierten. Die Erzeugung eines "grünen", klimaneutralen Brennstoffs unter Nutzung von Solarlicht entspräche diesem Szenario. Die photokatalytische Erzeugung von Wasserstoff nach dem Konzept aus Abb. 1 wurde in einem Modellexperiment realisiert.



**Abb. 1** Konzept zur photokatalytischen Erzeugung von Wasserstoff mit einer photogalvanischen Zweitopfzelle

■ Das Kernstück in diesem Konzept ist eine Halbzelle mit Photo-Blue-Bottle Lösung, die mit blauem Licht bestrahlt wird. Sie enthält den Photokatalysator Proflavin (PF+), den Opferdonor EDTA und den Redoxmediator Ethylviologen (EV++).

- Diese Halbzelle wird mit einer zweiten Halbzelle die Salzsäure und eine Platinelektrode enthält, zu einer photogalvanischen Zweitopfzelle kombiniert (Abb. 2). Gemäß dem Schema aus Abb. 1 wird im ersten Schritt ein Photokatalysator-Teilchen (PF+) durch Absorption eines Photons in einen elektronisch angeregten Zustand (PF+\*) versetzt. Daraus wird ein Elektron auf ein Redoxmediator-Teilchen EV++ übertragen, das dabei zu EV+ reduziert wird. Das oxidierte Photokatalysator-Teilchen wird mithilfe eines Opferdonor-Teilchens reduziert, wobei das Photokatalysator-Teilchen in seiner ursprünglichen Form regeneriert wird. Durch Abgabe jeweils eines Elektrons an die Elektrode der bestrahlten Halbzelle (Graphit oder Platin) werden reduzierte Redoxmediator-Teilchen wieder oxidiert. An der Platin-Elektrode der zweiten Halbzelle werden Protonen zu Wasserstoff-Molekülen reduziert.
- Die Vorrichtung aus Abb. 2 ist ein offenes System, weil ein Stoff, der Wasserstoff, aus dem System entweicht. In der Photo-Blue-Bottle Lösung werden durch Lichteinstrahlung dauerhaft angeregte Zustände erzeugt, die aber auch ständig durch Elektronenübertragungen verschwinden. Wenn die Raten, mit der sich in einem chemischen System bei Lichtbestrahlung angeregte Zustände bilden und verschwinden gleich sind, stellt sich ein photostationärer Zustand (kurz: Photostationarität) ein. Bei dem hier diskutierten Versuch kann man zwar weder

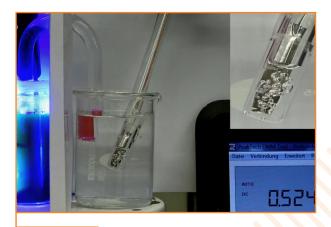


Abb. 2 Versuchsaufbau zur photokatalytischen Erzeugung von Wasserstoff in einer photogalvanischen Zweitopfzelle mit zwei LED-Taschenlampen ( $\lambda$  = 450 nm) als Lichtquellen

- sehen noch messen, wie schnell sich die angeregten Zustände des lichtabsorbierenden Photokatalysators Proflavin PF+ bilden und verschwinden, aber man kann sehen, dass sich die Lösung bei Lichtbestrahlung blau färbt und dauerhaft blau bleibt, solange Licht eingestrahlt wird. Da die blaue Farbe durch die reduzierte Form EV+ des Redoxmediators verursacht wird, bedeutet die konstant blaue Farbe der Lösung eine konstante Konzentration dieser reduzierten Spezies im System bei Lichtbestrahlung.
- Photostationäre Zustände spielen auch in anderen Modellexperimenten, die im Rahmen des Photo-MINT Projekts entwickelt wurden, eine entscheidende Rolle, beispielsweise bei der Aufwärtskonvertierung von Photonen nach dem Konzept der Triplett-Triplett-Annihilation TTA (siehe Abb. 3).



Abb. 3 Grünes Licht eines Laserpointers erzeugt eine blaue Leuchtspur in der upconversion Lösung

- Dabei kommen zwei funktionelle Farbstoffe zur Anwendung, der Triplett-Sensibilisator TPFPP-Pt(II) [5,10,15,20-Tetrakis-(2,3,4,5,6-penta-fluorophenyl)-porphyrin-Pt(II)] und der Singlett-Emitter Diphenylanthracen DPA.
- Mit der photokatalytischen Herstellung von "grünem" Wasserstoff, der Aufwärtskonvertierung von Photonen und weiteren Experimenten zu innovativen Inhalten mit photoaktiven Materialien können junge Menschen an der Universität und in der gymnasialen Oberstufe für interdisziplinäre, zukunftsrelevante Forschungsthemen motiviert werden.

# DFG-Project: Specific Heat Capacity Enhancement in a Nanofluid Studied via Molecular Dynamics Computer Simulation

Laufzeit: 1.1.2016 - 31.12.2018, Projektleiter: Prof. Dr. Reinhard Hentschke, Budget: 120.000,-€

Molten salts are used as heat transfer fluids and for short term heat energy storage in solar power plants. Experiments show that the specific heat capacity of the base salt is significantly enhanced by adding small amounts of certain nanoparticles. This effect, which is technically interesting and economically important, is not yet understood. Our aim is the theoretical investigation of the specific heat capacity in the aforementioned nanofluids on the molecular level using simulations. Nanofluids, consisting of a base liquid doped with small amounts of nanoparticles (often less than 1 wt. %), frequently exhibit specific heat capacities, which cannot be explained by mere additivity of the heat capacities of the constituents. Apparently in all experiments where this has been studied, the effect is qualitatively the same in both the solid and the liquid phase. For instance, if an increase of specific heat capacity is found in the liquid phase then there is also an increase in the solid phase. The same applies when the specific heat capacity is decreased by the addition of nanoparticles. Looking at the specific heat capacity as function of nanoparticle concentration, a local maximum is observed between 0.5 to 1.5 wt %.



By studying the effect of nanoparticles of the liquid's spectral density distribution, we conclude that the presence of the particles causes additional low frequency vibrational modes possibly in line with a reduction of the Frenkel frequency as proposed in the phonon theory of liquids by Brazhkin, Trachenko et al. However, the Frenkel frequency is not applicable in the solid state, even though, as stated above, the effect of the nanoparticles in the solid state is qualitatively the same as in the liquid state. As can be seen from the expansion of the internal energy, derived on the basis of the phonon theory of liquids, which is valid near the Dulong-Petit limit, there also is the effect of anharmonicity. Both, a shift of the Frenkel frequency and a change of the thermal expansion coefficient, can have similar effects on heat capacity. In general we can expect that both, a shift of the Frenkel frequency as well as anharmonicity, will affect the heat capacity. The particle induced changes in the spectral densities at higher frequencies may be interpreted in terms of particle imposed anharmonicity in the molecular potentials of the base liquid. This then would also apply in the solid state as well.

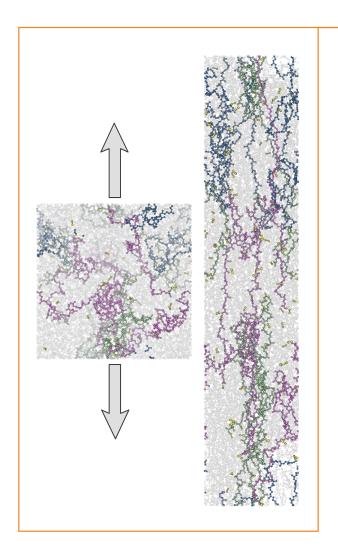


Abb. 1 Currently ongoing work focusses on the thermal properties of polymer nanocomposites – here exemplified by vulcanized stretched polyisoprene.

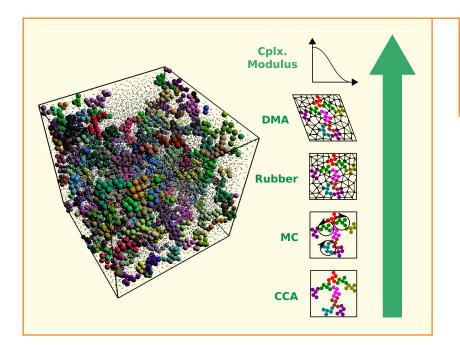
■ In summary, the effect of nanoparticles on the heat capacity, as well as on other physicochemical properties, of liquids is not colligative, i.e. it does not merely depend on the nanoparticle weight fraction. Even qualitatively it depends on particle type and size, possibly morphology. In other respects it is basic and almost universal, i.e. it affects the liquid and the solid phase alike and it is observed over a wide range of base fluids of small molecules as well as polymers. Here we have studied a particular system only. But the theoretical framework developed in the course of this work allows us to focus on three aspects - the generation of additional shear modes entering through the Frenkel frequency, anharmonicity, and possibly a shift of the Debye frequency - within the recent phonon theory of liquids.

### Industry-Project: Dynamic Moduli of Elastomer Nano-Composites via Molecular Modelling

Laufzeit: 2008-2018, Projektleiter: Prof. Dr. Reinhard Hentschke, Budget: 700.000,-€

this project is part of a continuous collaboration between the materials development department Continental Reifen Deutschland and the PIs group over the past 10 years.

- Sustainable mobility requires new and improved materials. This in particular applies to automobile tires, which currently must meet the new challenges posed by the advancing electrification. Our work current focusses on the relation between the physico-chemical properties of rubber and filler components in tire tread materials and the latter's mechanical performance. Its goal is the development of a scale-bridging simulation approach for the prediction of dynamic moduli in highly non-linear elastomer composites beginning on the molecular level.
- Generally there are too many orders of magnitude separating the molecular from the macroscopic scale. There is however one particular quantity, accessible from the molecular scale, which is a common laboratory indicator for macroscopic tire performance. This quantity is , the ratio of the loss modulus to the storage modulus. Its calculation is a goal of this work aside from other fundamental properties of filled elastomer materials. Plotted vs. temperature, holds information about the grip and rolling resistance, i.e. information related to tire safety and fuel efficiency.
- The properties of rubber are strongly influenced by the distribution of filler within the polymer matrix. We develop modelling approaches to the calculation of dynamic moduli of filled elastomers based on filler morphologies derived from the experimental interface tensions of the material's components. A Monte Carlo-based morphology generator, developed previously in our group, is used to build model compounds on the µm-scale. Subsequently the Monte Carlo morphologies are mapped onto on a coarse grained model, allowing to obtain the amplitude and frequency dependence of the dynamic moduli during cyclic deformations. This combination of models ties the experimental surface tensions, characterizing the individual components, to the dynamic behavior of the macroscopic material.



Right: simulation snapshot; left: a series of pictograms illustrating the simulation approach from the filler network generation (bottom) to the dynamical moduli (top).

■ Our work is a complete conceptual approach to a scale-bridging prediction of dynamic moduli. The approach relates chemical composition, starting from the fully dispersed system consisting of a polymer blend including filler, to the dynamical moduli of the same system in the flocculated state. Morphology generation herein in based on experimentally determined surface tensions of the components. This, in principle, allows to link the molecular or chemical level to the macroscopic performance of the material. At this stage the interactions in the coarse-grained model for the dynamics are still rather simplistic. Nevertheless they do mimic crucial ingredients, like for instance the reversible breaking of 'bonds', either at the filler-filler or the filler-polymer interface, which allows to study their relative importance on the Payne effect. The aforementioned simplicity also permits the systematic study of the parameter space underlying the model, which permits to elucidate their relative influence on the moduli.



### Impressum

Herausgeber:

Wuppertal Center for Smart

Materials & Systems

Bergische Universität Wuppertal

Campus Freudenberg

Rainer-Gruentner-Str 21 42119 Wuppertal

Email: cmats@uni-wuppertal.de

www.cmats.uni-wuppertal.de

Redaktion:

Prof. Dr. Thomas Riedl

Design & Layout:

Timocin Uzun

Foto auf dem Cover:

Dr. Nico Meuter

(meuter@uni-wuppertal.de)

Druck:

Druckhaus Ley + Wiegandt GmbH

Das Wuppertal Center for Smart Materials & Systems dankt der Bergischen Universität Wuppertal für die finanzielle und technische Unterstützung.

Redaktionsschluss:

Februar 2020