

# Schlüsselmaterialien für Technologiedurchbrüche



**HZB**  
 Prof. Dr. Klaus Lips  
 lips@helmholtz-berlin.de  
 Prof. Dr. Bernd Rech  
 bernd.rech@helmholtz-berlin.de

**ZAE Bayern**  
 Dr. Gudrun Reichenauer  
 reichenauer@zae.uni-wuerzburg.de

**Jülich**  
 Prof. Thomas Kirchartz  
 t.kirchartz@fz-juelich.de

**ZSW**  
 Dr. Wiltraud Wischmann  
 wiltraud.wischmann@zsw-bw.de

**DLR**  
 Prof. Dr. Martin Schmücker  
 martin.schmuecker@dlr.de

**Fraunhofer ISE**  
 Dr. Stefan Henninger  
 stefan.henninger@ise.fraunhofer.de

**ISFH**  
 Dr. Rolf Reineke-Koch  
 r.reineke-koch@isfh.de

**IZES**  
 Dr. Bodo Groß  
 gross@izes.de

Um die Energiewende langfristig erfolgreich gestalten zu können, sind Durchbrüche in der Materialforschung notwendig. Ziel ist es, Materialien so zu entwickeln, dass sie optimale Wandlungseffizienzen gewährleisten bei gleichzeitig geringem Energie- und Ressourceneinsatz.

Dieser Beitrag soll zeigen, an welcher Stelle und in welchem Umfang Erfolge durch die Materialforschung erzielt werden können.

## Technologieentwicklung vs. Technologiedurchbruch

Die Entwicklung von Bauelementen ist in der Regel ein komplexes n-dimensionales Optimierungsproblem, wobei n für eine große Zahl an Freiheitsgraden der Material- oder Bauelementherstellung steht. Durch vorhandenes „Know-how“ kann mit Hilfe von einfachen analytischen Methoden, die ein schnelles Feedback erlauben (Fingerprint-Analytik), recht schnell eine Verbesserung der Technologie erzielt werden (Reduzierung der Kosten, Verbesserung des Wirkungsgrads).

Eine Technologieentwicklung stößt aber an ihre Grenzen, wenn zusätzlich ein fundiertes Verständnis der physikalisch-chemischen Grundlagen notwendig ist, um weitere Verbesserungen zu erreichen – das „Know-why“ gewinnt entscheidende Bedeutung. Dazu müssen analytische und theoretische Methoden entwickelt werden, die in der Regel in der Grundlagenforschung ausgearbeitet und in der Praxis angewendet werden können. Ein technologischer Durchbruch wird schließlich dann erzielt, wenn es gelingt, das „Know-why“ in ein „Know-better-how“ zu überführen.

Im Folgenden soll an einigen Beispielen von Mitgliedsinstituten des FVEE erläutert werden, welche Möglichkeiten die Materialforschung für solche Durchbrüche bereithält und wie der Aufbau von neuen Forschungsinfrastrukturen dazu wesentlich beitragen kann.

## Perowskit-Solarzellen

Die Wirkungsgradentwicklung verschiedener Photovoltaik-Technologien von den 70er Jahren bis heute wird im sogenannten NREL-Chart [1] dargestellt (*Abbildung 1*). Der Trend dieser Technologieentwicklung ist stetig positiv und von sehr vielen Durchbrü-

chen gekennzeichnet. Für die letzten 40 Jahre lässt sich eine durchschnittliche Verbesserung des Wirkungsgrades von ca. 0,5% pro Jahr beobachten. Dabei ist erwähnenswert, dass die Photovoltaik die Energietechnologie mit dem noch höchsten Entwicklungspotenzial ist. Der physikalisch mögliche Wirkungsgrad liegt bei über 80% (bei maximal möglicher Konzentration des Sonnenlichts von ca. 46000-fach), welcher aber bei einfacher Fortsetzung obiger Technologieverbesserung weitere 80 Jahre intensiver Forschung und Entwicklung nach sich ziehen würde.

Um den Wirkungsgrad aus existierenden Technologien heraus schneller zu verbessern, bedarf es der Implementierung von Stapelzellen, die verschiedene Materialien miteinander kombinieren, die gemeinsam eine höhere Energieausbeute erzielen. Eine Materialgruppe, welche sich von ihren optischen und elektrischen Eigenschaften hierfür in Kombination mit bestehenden Technologien wie Silizium oder Verbindungshalbleitern hervorragend eignet, sind die sogenannten Perowskite.

Die Perowskit-Solarzellen haben in einem nur sehr kurzen Entwicklungszeitraum von sechs Jahren Wirkungsgradsteigerungen von 3% pro Jahr erreicht und auf kleinen Flächen Wirkungsgrade von über 20% demonstriert. Können diese Materialien zu einer Schlüsseltechnologie für die Photovoltaik werden? Um diese Frage schnell zu beantworten, brauchen wir das angesprochene „Know-better-how“, um diese neue Technologien zu verstehen, zu optimieren und in eine geeignete Produktion zu überführen. Perowskite nutzen den blauen Anteil des Sonnenlichts besser und können daher in Kombination mit Silizium- oder Chalkopyrit-Solarzellen (CIGS, Kupfer-Indium-Gallium-Diselenid) in einer sogenannten Stapelzelle (Tandemsolarzelle) das gesamte Sonnenspektrum wesentlich effizienter nutzen. Der Wirkungsgrad der besten individuellen Zellen liegt zwischen 18% und 28%. Blicke diese Leistung auch in einer Stapelzelle erhalten, wäre das Wirkungsgradpotenzial einer solchen Stapelzellentechnologie bei über 35%.

Leider weisen die Perowskite noch einige wesentliche Herausforderungen auf:

- Es sind komplexe Hybrid-Materialien, die in einer sogenannten Perowskit-Kristallstruktur wachsen und unter anderem Blei und Halogene enthalten. Auf Grund seiner Toxizität muss das Blei in dieser Struktur ersetzt werden.

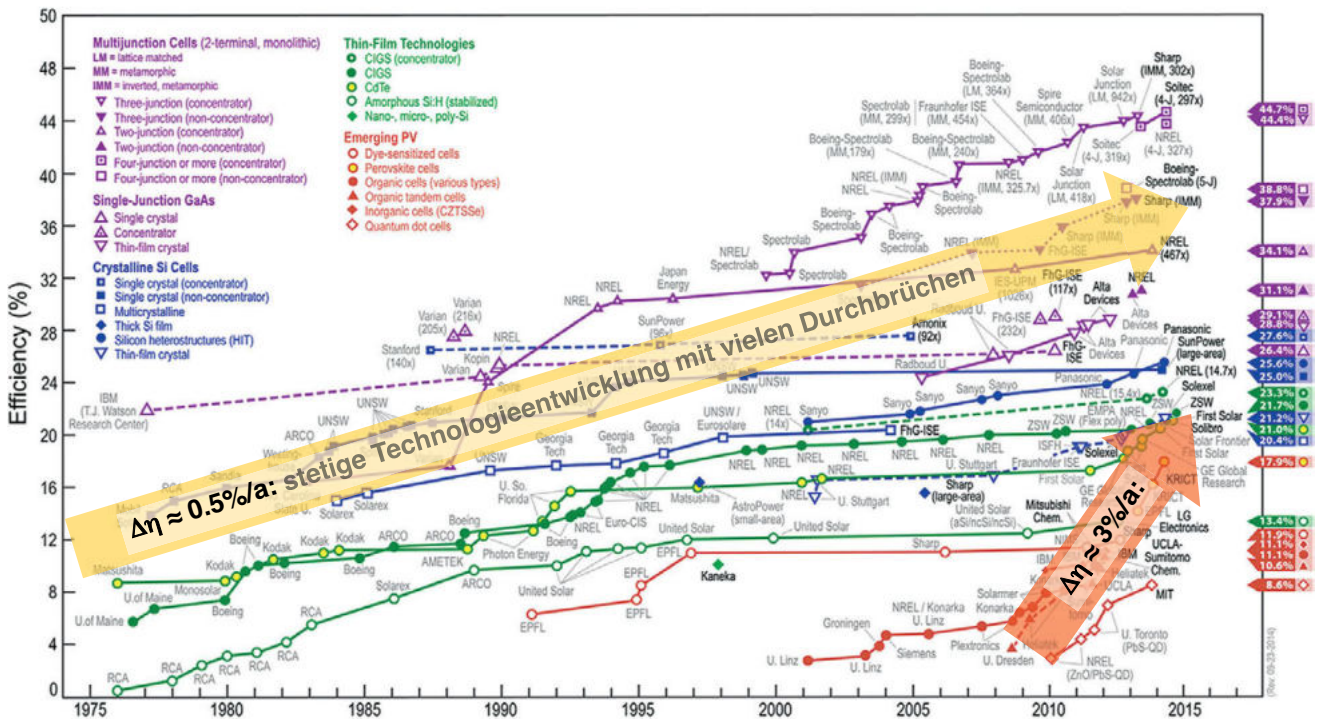


Abbildung 1  
Wirkungsgradentwicklung verschiedener Photovoltaik-Technologien  
© NREL (National Renewable Energy Laboratory)

- Auch ist die Hochskalierung auf große Flächen im Ansatz noch nicht verstanden.
- Darüber hinaus ist die Langzeitstabilität der Perowskit-Solarzellen derzeit noch nicht zufriedenstellend.

Um die genannten Herausforderungen zu überwinden, bedarf es größter Anstrengungen, die gemeinsam vom HZB, Jülich und ZSW angegangen werden.

### Absorberbeschichtung für Solartermische Anwendungen

Das oben beschriebene Vorgehen in der Materialforschung lässt sich auch auf andere Themengebiete anwenden, beispielsweise bei der Solartermie. Ziel ist es dabei, das Sonnenlicht in Wärme umzuwandeln. Um dieses Ziel zu erreichen, muss ein möglichst großer Anteil der eingestrahlten Solarenergie auf ein Medium wie Wasser übertragen werden. Es gilt, Reflexion und Abstrahlverluste zu minimieren bzw. entsprechende Absorberschichten zu entwickeln, welche möglichst viel Energie absorbieren. Dazu wird beispielsweise eine schwarze Oberfläche verwendet, welche jedoch auch gleichzeitig wieder viel Wärme abstrahlt. Unter anderem ist es der Firma Almeco gelungen, diese Abstrahlung der Wärme zu minimieren. Mittlerweile sind Absorberbeschichtungen verfügbar, welche 95 % der Solarstrahlung absorbieren

und nur noch 5 % des Wärmeverlusts eines Schwarzen Strahlers emittieren. Am IZES werden innerhalb der Forschungsgruppe „Angewandte Solartechnik“ seit etwa 15 Jahren entsprechende Prüfungen solarthermischer Anlagen und deren Komponenten für verschiedene Hersteller durchgeführt. Schwerpunkte der Forschungsarbeit liegen derzeit in der verbesserten Systemintegration thermischer Solartechnik durch den Einsatz zusätzlicher, effizienter Technologien (wie Hybrid-Kollektoren, Latentwärmespeicher und Wärmepumpen). Weitere Schwerpunkte sind Forschungsarbeiten im Bereich der Normung und Zertifizierung, sowie des Know-how-Transfers in Schwellen- und Entwicklungsländer.

### Solkollektoren mit Wärmeschutzverglasung

Das ISFH arbeitet ebenfalls an Effizienzsteigerungen für die Solartermie. Hier wird ein robuster Flach-Kollektor entwickelt, dessen Wärmeverluste durch eine Isolierverglasung stark reduziert werden. Der Glaszwischenraum ist mit Argon gefüllt, um die Wärmeleitung und Konvektionsverluste zu reduzieren. Wesentlich ist hierbei eine besondere Beschichtung der Isolierverglasung. Der Technologiedurchbruch ist durch ein Verfahren gekennzeichnet, das es erlaubt, Glasplatten in Größen von 18 Quadratmetern bei relativ niedriger Temperatur zu beschichten. Das Po-

tenzial dieser neuen Flach-Kollektoren ist enorm, da Effizienzsteigerungen von bis zu 70% im typischen Arbeitsbereich erreicht worden sind. Dadurch lassen sich auch die höheren Kosten der Verglasung kompensieren. Die genannten Beispiele zeigen Technologiedurchbrüche, die stark auf den Erkenntnissen beruhen, die in der Materialforschung gewonnen wurden.

### Schlüsselmaterial Aerogel

Aerogele sind poröse Materialien, die über ein Bottom-up Verfahren (Sol-Gel Prozess) hergestellt werden. Über Einstellung der Syntheseparameter lässt sich die Größe der Sol-Partikel und deren 3-dimensionale Vernetzung zu einem Gel sehr detailliert kontrollieren. Ziel der anschließenden Trocknung ist, das im Gel vorliegende Festkörpergerüst zu erhalten und lediglich das Lösungsmittel im Gel durch Luft (Aerogel) zu ersetzen.

Mit diesem Verfahren lassen sich poröse Werkstoffe mit maßgeschneiderter chemischer Zusammensetzung (auch: hochrein) und mittleren bis hohen Porositäten (bis zu 99%) in Kombination mit gezielt einstellbaren Porengrößen im Sub-Mikrometerbereich (1–1000 nm) bereit stellen. (Entsprechend kann man selbst in rein Metalloxidbasierten oder organischen Aerogelen spezifische Oberflächen von mehreren 100 m<sup>2</sup>/g erreichen (bei Kohlenstoff-Aerogelen bis zu 2000 m<sup>2</sup>/g)).

Die Toolbox, die dieses Verfahren bereit stellt, ist fast unbegrenzt, da beliebige Formkörper auch als Komposite synthetisiert werden können, indem grobporige Matrices mit der Sol-Vorstufe infiltriert werden oder Additive, z. B. in Form von Nanopartikeln, in der Prozessierung zugegeben werden, um den Werkstoff spezifisch zu funktionalisieren.

Methoden bei der Material-Entwicklung wie Röntgenstreuung oder NMR-Bildgebung (= Nuclear Magnetic Resonance = Kernspinresonanz) sowie Modellierungen haben bei der Entwicklung von maßgeschneiderten Schlüsselstrukturen z. B. für den Bereich Aerogel als Wärmedämmkomponente enorm geholfen.

### Metallorganischen Gerüstverbindungen

Adsorptionsprozesse an hochporösen Materialien sind heute das Kernelement in zahlreichen technischen Verfahren. Dazu zählen z. B. die Gasspeicherung und -trennung, thermisch angetriebene Wärmepumpen und Kältemaschinen. Zum Einsatz kommen dabei klassischerweise Silicagele, Zeolithe oder Silica-Aluminophosphate.

Im Mittelpunkt der Forschung steht derzeit die neue Materialklasse der metallorganischen Gerüstverbindungen (metal organic frameworks, MOFs). Diese kristallinen Verbindungen basieren auf einem einzigartigen chemischen „Baukastensystem“ und vereinen eine bislang nicht gekannte chemische Variabilität, mit teils enorm hohen inneren Oberflächen (SBET > 4000 m<sup>2</sup>/g). Weiterhin zeigen diese Materialien im Vergleich zu den oben genannten klassischen Materialien eine z. T. um den Faktor 4 höhere Aufnahmekapazität für verschiedene Kältemittel. Als direkte Folge erhöhen sich die Anforderungen an den Stoff- und Wärmetransport, besonders bei zyklisch betriebenen Anwendungen wie Adsorptionswärmepumpen und -kältemaschinen. Zum einen muss eine gute Zugänglichkeit des Kältemittels (z. B. Wasser, Alkohol) an den Oberflächen und damit den Adsorptionszentren gewährleistet sein, zum anderen muss eine hohe thermische Ankopplung erreicht werden, um die entstehende Wärme schnell abführen zu können. Sorptiv beschichtete Wärmeübertragerstrukturen stellen für zahlreiche Anwendungen die optimale Lösung dar.

Am Fraunhofer ISE wurden zwei komplementäre Beschichtungsverfahren entwickelt, die diese Voraussetzungen hervorragend erfüllen, und bereits zum Patent angemeldet wurden:

1. Binderbasierte Beschichtung: hier wird das Sorptionsmaterial zusammen mit einem Haftvermittler (Binder) auf die Trägerstruktur aufgebracht. Dieses Verfahren kann bereits auf einen industriellen Maßstab angewandt werden.

2. Direktaufkristallisationsverfahren, welches zum Beispiel in Adsorptionskältemaschinen oder -wärmepumpen angewandt werden kann.

### Oxidische faserverstärkte Keramik für die Gasturbine

Faserverstärkte Keramik erweitert die hohe Temperaturbeständigkeit monolithischer Keramik um gute mechanische Eigenschaften, wie insbesondere ein nicht-sprödes Versagensverhalten. Dadurch werden Hochtemperaturanwendungen, in denen neben hohen Bauteiltemperaturen auch mechanische Beanspruchungen auftreten, für keramische Werkstoffe zugänglich. Oxidische Faserkeramik (z. B. bestehend aus Aluminiumoxid) weist zusätzlich eine hohe Korrosionsbeständigkeit auf. Ein derartiges Material wird am Institut für Werkstoff-Forschung des DLR Köln unter dem Namen „WHIPOX“ entwickelt und derzeit im Rahmen verschiedener Projekte für den industriellen Einsatz vorbereitet. Ein wesentlicher Fokus liegt dabei auf Bauteilen im Heißgaspfad von Turbinen, da dort eine Erhöhung der Temperaturbeständigkeit der verwendeten Bauteile benötigt wird. Durch höhere Brenntemperaturen kann der Wirkungsgrad des Systems signifikant erhöht werden. Dies erhöht die

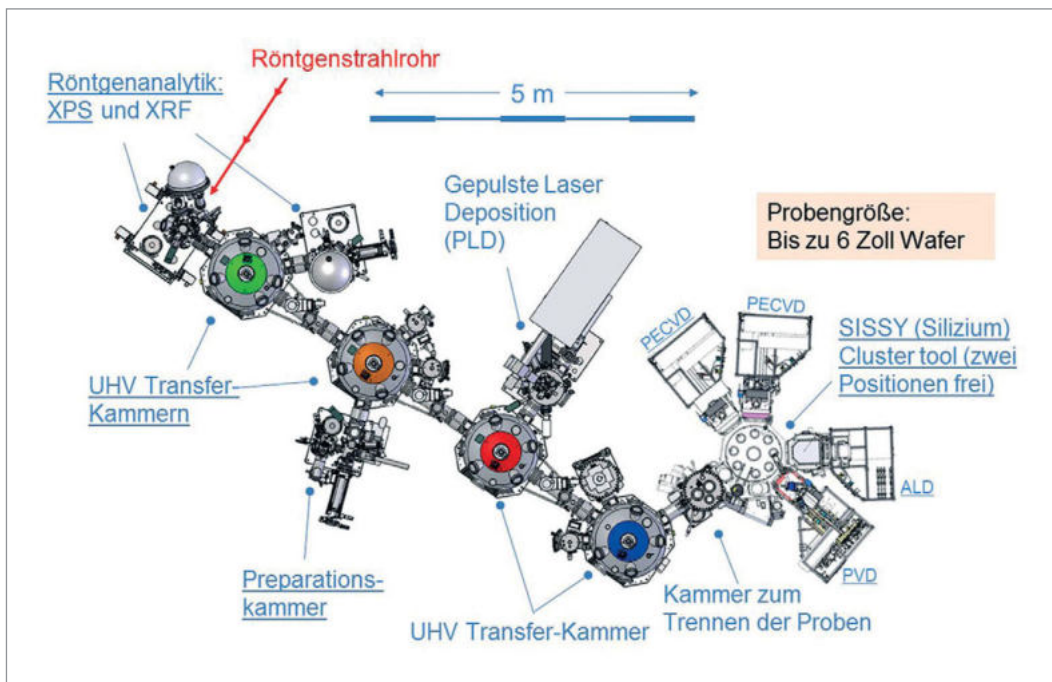


Abbildung 2  
Modulares Ultrahochvakuumsystem im Materiallabor EMIL  
(Grafik: HZB)

Effizienz von (Mikro-) Gasturbinen, die durch ihre flexible Einsatzmöglichkeit eine wichtige Rolle in der Energiewende spielen.

Der Einsatz von keramischen Faserverbundwerkstoffen im industriellen Maßstab erfordert eine hohe Kenntnis der Materialeigenschaften. Diese können stark temperatur-, last- und zeitabhängig sein. Die Auslegung von Bauteilen, wie beispielsweise eines thermomechanisch beanspruchten Flammrohrs einer Gasturbine, wird durch Simulationen gestützt. Eine wesentliche Rolle spielt dabei die Finite Elemente Methode, welche häufig für die Abbildung von strukturmechanischen Problemstellungen angewendet wird. Durch dieses Mittel können maximal beanspruchte Bereiche eines Bauteils identifiziert und vorliegende Spannungen mit Materialkennwerten verglichen werden. Bei der Auslegung von Bauteilen aus „WHIPOX“ wird erweiternd ein stochastischer Ansatz verfolgt. Dies liegt im Vorhandensein von statistisch verteilten Defekten (Poren) im Werkstoff begründet. Durch diesen Berechnungsansatz können Bauteilausfallwahrscheinlichkeiten ermittelt werden, was die künftige Anwendung des Werkstoffs auch in Bereichen ermöglicht, die hohe Sicherheit gegen Ausfall erfordern.

#### EMIL: Energy Materials In-Situ Laboratory Berlin

In den oben genannten Beispielen spielt die Materialforschung und die dezidierte Röntgenanalytik an dünnen Schichten eine entscheidende Rolle. In vielen Fällen werden die elektronischen und optischen

Eigenschaften von den jeweiligen Grenzflächen geprägt. Ein fundiertes Verständnis der chemisch-elektronischen Eigenschaften dieser Grenzflächen sowie deren mikroskopischer Struktur und deren gezielte Optimierung sind unabdingbar für eine gezielte Materialentwicklung.

Synchrotron-basierte röntgenspektroskopische Analysemethoden bieten hier einzigartige Möglichkeiten, da sie sehr direkt die elektronisch-chemische und morphologische Struktur von Ober- und Grenzflächen abbilden können. Um solche Messungen am realen Bauelement mit einer Vielzahl von Schichtstrukturen durchführen zu können, sollten idealerweise die Grenzflächen und grenzflächennahen Schichten ohne Vakuumunterbrechung und möglichst während des Wachstums untersucht werden. Die gezielte Anpassung der Prozessparameter und Materialeigenschaften im Hinblick auf optimale Grenzflächenstrukturen ist dabei extrem aufwendig, da eine kontinuierliche Prozessoptimierung über weite Parameterfelder notwendig ist. Der dafür erforderliche permanente Zugang zu den erwähnten Analysemethoden ist bei den derzeitigen Zugangsmodellen an Synchrotronquellen nicht gegeben.

Um diese Lücke in der wissenschaftlichen Infrastruktur zu schließen, wird am Berliner Synchrotron BESSY II, einer sehr brillanten Quelle für Röntgenlicht mittlerer Energie (soft and tender X-rays), das Materiallabor EMIL (Energy Materials In-Situ Laboratory Berlin) aufgebaut [2]. EMIL erlaubt direkt und mit täglichem Zugang zum Synchrotron, eine Röntgenanalytik entweder direkt am wachsenden Film

(in-situ) oder aber ohne Unterbrechung der Vakuumbedingungen (in-system) an sehr komplexen Stapelfolgen. Hierbei ist der Anregungsenergiebereich von 80 eV bis 10 keV enorm groß, sodass auch eine Tiefenauflösung von der Oberfläche bis hin zu einigen Mikrometern möglich sein wird.

EMIL verfügt über ein modulares Ultrahochvakuum-system (siehe *Abbildung 2*), welches einen flexiblen Austausch von Präparationskammern ermöglicht und somit über 20 unterschiedliche Dünnschichtpräparationsmethoden integrieren kann. Die maximale Probengröße kann dabei bis zu 6 Zoll im Durchmesser (oder 10 cm × 10 cm) betragen.

EMIL wird ein für die gesamte Kette der Bauelementherstellung wichtiges Analysegerät und kann für die gesamte Energieforschung eingesetzt werden. EMIL erlaubt zum ersten Mal diese dezidierte Analytik mit sehr kurzer Feedbackzeit in einer Reihe von Technologieentwicklungen einzusetzen und somit eine Entwicklung unter „Know-better-how“-Bedingungen zu ermöglichen. Ab 2016 wird EMIL der nationalen und internationalen Energieforschung und der Industrie zur Verfügung stehen und den Forschungsstandort Deutschland positiv prägen [3].

## Fazit

Abschließend ist festzustellen, dass ein umfassendes Verständnis der komplexen Zusammenhänge die Entwicklung und Validierung von zuverlässigen Modellen erfordert. Dazu sind rechnergestützte Simulationen notwendig, die auf atomarer Ebene Strukturen beschreiben, Wärmekapazitäten vorhersagen und Oberflächenchemien bestimmen, sowie Verfahren, die komplette Bauelemente und deren Komponenten vorhersagen können.

Diese beiden Konzepte, neue Materialforschungsmethoden und Simulationen, sind zusammen ein wesentlicher Schlüssel für Durchbrüche in der Materialforschung für die Energiewende.

Große Entdeckungen, die gemacht werden, haben sehr viel mit Know-how, aber oft auch sehr viel mit Zufall zu tun. Um aus diesen Entdeckungen Schlüsseltechnologien machen zu können, ist es notwendig, die Entwicklungen mit dem oben genannten Know-better-how zu begleiten. Dies bewirkt eine möglichst schnelle Rückkopplung von wesentlichen Ergebnissen in die Produktion. Die Forschenden brauchen die großen wissenschaftlichen Infrastrukturen wie das EMIL und die Laborinfrastrukturen der Institute einschließlich der Rechenzentren als Werkzeuge, um Ideen in die Innovation von morgen umzusetzen. Wissen ist der Schlüssel für unsere Zukunftsfähigkeit.

## Literatur

[1] [http://www.nrel.gov/ncpv/images/efficiency\\_chart.jpg](http://www.nrel.gov/ncpv/images/efficiency_chart.jpg)

[2] EMIL: The Energy Materials In Situ Laboratory Berlin; K. Lips, D.E. Starr, M. Bär, T. F. Schulze, F. Fenske, S. Christiansen, R. van de Krol, S. Raoux, G. Reichardt, F. Schäfers, S. Hendel, R. Follath, J. Bahrtdt, M. Scheer, G. Wüstefeld, P. Kuske, M. Hävecker, A. Knop-Gericke, R. Schlögl, B. Rech; proceedings of the IEEE PVSEC, Denver Colorado, USA (2014) 0698.

[3] <http://www.helmholtz-berlin.de/projects/emil/>