

Nationale Forschungsdateninfrastruktur für Materialien der photo-elektro-chemische Energiekonversion (NFDI4ECM)

Sprecher/in: Prof. Dr. A. Wouter Maijenburg, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, wouter.maijenburg@chemie.uni-halle.de

Komplexe oxidische Materialien (ternäre Verbindungen, Übergangsmetalloxide) gewinnen als vielversprechende Materialklasse in Heteroschichtsystemen für die Photovoltaik (PV) und die photoelektrochemische Wasserspaltung (PEC) zunehmend an Interesse in Forschung und Anwendung. Die besonderen strukturellen, elektronischen und chemischen Eigenschaften sowie die Funktionsstabilität für die solare Energiekonversion (PV, PEC) spielen dabei eine zentrale Rolle. Zusätzlich können auch ferroelektrisch getriebene Mechanismen helfen, die Effizienzlimits von herkömmlichen Halbleitermaterialien zu überwinden.

Die meisten oxidischen Materialien weisen große Bandlücken (> 2 eV) auf und nutzen nur einen geringen Teil des solaren Spektrums (8-20%) bzw. haben ungünstige Eigenschaften für den Ladungsträger-Transport. Deswegen sind Heteroschichtsysteme mit angepassten Bandstrukturübergängen erforderlich. Diese werden fundamental von Grenzflächeneigenschaften bestimmt. In den vergangenen Jahren wurden u.a. durch grundlegende Arbeiten von den Antragstellern die physikalischen Mechanismen an ausgewählten komplexen Materialsystemen (z.B. $\text{Cu}(\text{In,Ga})(\text{S,Se})_2$, BiFeO_3) erforscht und das Potential für revolutionäre technologische Materialentwicklungen gezeigt.

Für den Einsatz von oxidischen Heteroschichtsystemen in realen Solarzellen und PEC-Bauteilen besteht allerdings die zentrale Herausforderung in der Selektion und dem Design von strukturellen und elektronischen Grenzflächeneigenschaften unter Berücksichtigung von prozessinduzierten Defektstrukturen und Dotierungen. Aufgrund der großen Vielfalt von grenzflächen-definierten Struktur-Eigenschaftsbeziehungen sind Methoden der konventionellen experimentellen Materialentwicklung mit hoher Ineffizienz sowie Versagensrisiken behaftet.

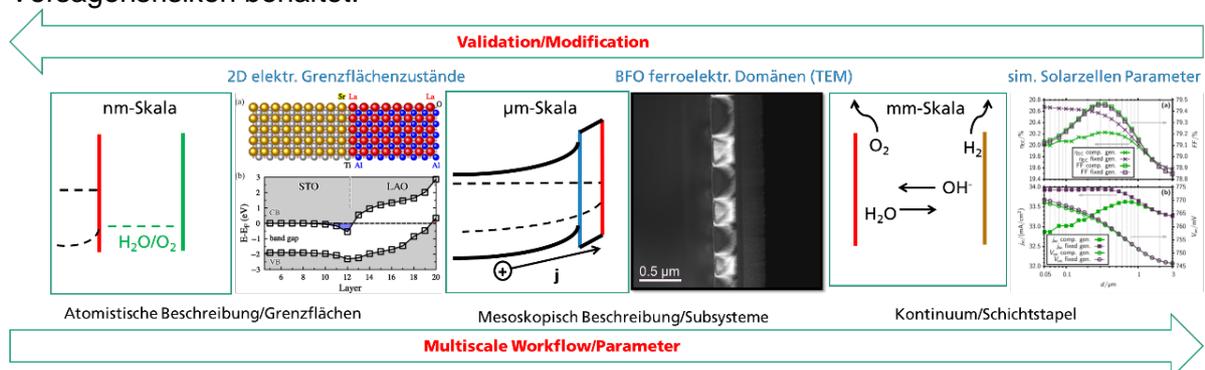


Abbildung 1. Skalenübergreifendes Grenzflächen-Engineering in oxidischen Dünnschichtsystemen für die solare Energiekonversion im Verbund PV/PEC

Damit ergibt sich das übergeordnete Ziel im Aufbau eines Datenmanagement für das digitale Grenzflächen-Engineering in oxidischen Heteroschichtsystemen zur solaren Energiekonversion (PV/PEC). Durch neuartige Modellierung/Screening-Methoden soll mittels Multiskalensimulation das beschleunigte digitalisierte Grenzflächenengineering am Beispiel von konkreten und elektrochemisch funktionalen Heteroschichtsystemen entwickelt werden. Die Simulation reicht dabei von der atomistischen Skala bis zur Bauelementdimension. Im Fokus stehen methodische Ansätze zur Vorselektion von Grenzflächeneigenschaften für eine optimale elektronische Bandlücke (und die Verbindung der Bandlücken in Heteroschichtsystemen) für die PV sowie PEC-Wasserspaltung auf der Basis von Material- und Prozessparametern.

Im Konsortium sind die beiden Basissysteme Cu(In,Ga)(S,Se)_2 (CIGS) und BiFeO_3 Material- und Prozessdaten bereits übergreifend etabliert. Es sollen charakteristische Depositionsverfahren (PLD, ALD, Sputterdeposition, thermische Verdampfung) in geschlossenen Workflows erfasst und für das digitale Engineering von oxidischen Grenzflächen in Heteroschichtsystemen befähigt werden. Die Ausbildung der Bandlücke, des Fermi-Niveaus und der Austrittsarbeit an den verschiedenen Grenzflächen beim Übergang von epitaktischen Modellsystemen (ein-kristalline Substrate) zu polykristallinen Schichtsystemen für skalierbare Anwendungen (PV, PEC) sollen aus den theoretischen Materialeigenschaften modelliert und experimentell überprüft werden. Neben strukturellen Parametern sollen Defektstrukturen, Dotierungen und ferroelektrische Grenzflächeneigenschaften adressiert werden. Eine Validierung der Modellvorhersagen erfolgt durch experimentelle Untersuchungen mit insitu-Methoden und auf atomarer Skala. Final ist eine Übertragung der Methodik auf breitere Parameterräume von Materialien/Prozessen geplant, wobei der Schwerpunkt auf der Definition von digitalen Workflows und Ontologien zur universellen Bewertung von Grenzflächeneigenschaften liegt.

Der Stand der Wissenschaft und Technologie beim Grenzflächen-Engineering in oxidischen Dünnschichtsystemen für die solaren Energiekonversion (PV/PEC) wird bestimmt durch drei exzellent entwickelten methodische Ansätze, mit derzeit noch schwacher Verknüpfung:

- A: Experimentelles Materialdesign von kompletten PV/PEC-Heteroschichtsystemen durch aufwändige iterative Prozessierungs-, Charakterisierungs- und Modellierungsschritte.
- B: Materialscreening für komplexe Halbleitermaterialien anhand ausgewählter Volumeneigenschaften.
- C: Theoretische Simulation und Modellierung von Schicht- und Grenzflächen-Subsystemen anhand von atomistischen Modellen.

Im Rahmen von laufenden Forschungsprojekten sind die Partner des Konsortiums mit hoher internationaler Expertise in diesen drei methodischen Schwerpunkten aktiv.

AG Marques/MLU Halle verfügt über langjährige Erfahrung in der Entwicklung und Anwendung von ab-initio Methoden der Materialwissenschaft. Dazu gehört nicht nur die Dichtefunktionaltheorie für strukturelle und andere Grundzustandseigenschaften, sondern auch modernste Viele-Körper-Methoden zur genauen Berechnung von Quasiteilchen-Bandstrukturen, Bandenausrichtungen oder optischen Absorptionsspektren.

AG Mertig/MLU Halle arbeitet seit einer Dekade (2008-2019 gefördert durch die DFG im SFB 762: Funktionalität oxidischer Grenzflächen) an der Beschreibung der elektronischen und daraus resultierenden funktionalen Eigenschaften von oxidischen Grenzflächen ausgehend von der atomaren Skala. In der Arbeitsgruppe wurden dazu Computercodes basierend auf der Dichtefunktionaltheorie entwickelt, die es gestatten, die oxidische Grenzfläche bzw. Heterostruktur parameterfrei zu beschreiben. Neben der strukturellen Relaxation der Grenzflächenstruktur liegt besondere Expertise für die Simulation von Defekten vor.

AG Scheer/MLU Halle mit Schwerpunkt Photovoltaik hat sich in den vergangenen Jahren mit der Entwicklung eines digitalen Zwillings für Dünnschichtsolarzellen beschäftigt (DFG Projekt SCHE 1745/4-1, 2015-19). Im DFG Projekt SCHE, 2019-22, wird dieser digitale CIGS Zwilling zur Erforschung von Oberflächeneigenschaften unter Nutzung simultaner Simulation von spektroskopischen Oberflächenzuständen und Ladungsträgerdynamik genutzt.

AG Hagendorf/Fraunhofer CSP arbeitet in der anwendungsorientierten Forschung für neue Materialien und Technologien in der Photovoltaik. Es wurden in der Vergangenheit grundlegende Arbeiten zur PID-Defektdiagnostik an Solarzellen geleistet. Derzeitige Aktivitäten fokussieren sich auf hochauflösende Hochdurchsatz-Materialanalytik und Metrologie für neuartige Solarzellen (Fraunhofer-Leitprojekt „MaNiTU“ (2019-2023),

Fraunhofer PREPARE „NeoPEC“ (2020-2022), BMWi/„NextStep“ und „HJTFab“ (2018-2021)“.

AG Bhatnagar/ZIK ist als Nachwuchsgruppe "Light for High-Voltage PhotoVoltaics" (L4HVPV) am Zentrum für Innovationskompetenz (ZIK) SiLi-nano aktiv. Der Schwerpunkt der Gruppe liegt auf ferroelektrischen Materialien für photovoltaische Anwendungen. Die Forschungsziele lassen sich in die folgenden Kategorien einordnen: 1) Nanoschichten aus ferroelektrischen Oxiden unter Verwendung von Hetero-Epitaxie, 2) Verzerrungs-Engineering durch epitaktische Grenzflächenbelastung, 3) Substitution/Dotierung für das Bandlücken-Engineering (in Zusammenarbeit mit der AG Ebbinghaus, Institut für Chemie der Uni Halle) 4) Domänen-Engineering, 5) Synthese und Untersuchung von ferroelektrischen Oxid-Grenzflächen (im Rahmen des DFG-geförderten SFB 762 (A12), Jan 2018-Dez 2019)

AG Maijenburg/ZIK ist als Nachwuchsgruppe „Light for Hydrogen“ (L4H) unter Jun.-Prof. Dr. Wouter Maijenburg seit 2016 mit dem Einsatz von verschiedenen Schichten und Nanostrukturen für die solare (photo(elektro)chemische) Wasserspaltung beschäftigt. Mit dieser Anwendung im Mittelpunkt, werden verschiedenen Materialien (u.a. MOFs, Cu₂O, CuBi₂O₄, BiVO₄, CuGaSe₂/CuGa₃Se₅ und CoP) mittels verschiedenen Herstellungsverfahren (u.a. Atomlagendeposition, elektrochemische Abscheidung, Elektrosinnen und thermische Verdampfung) hergestellt, und dessen Eigenschaften für die solare Wasserspaltung untersucht.

Durch die Teilnahme an der NFDI-Konferenz sollen der Austausch mit bestehenden und in Gründung befindlichen Konsortien eröffnet werden. Ziel ist dabei die Sondierung von Möglichkeiten zur Einbindung der Kompetenzen und Expertise der Partner in laufende NFDI-Aktivitäten oder die Bildung von neuen Netzwerken. Als thematischer Schwerpunkt wird für das Konsortium die Materialforschung für erneuerbare Energien und Wasserstofftechnologien gesehen.

Vorgesehene Mitglieder des Konsortiums (Co-Sprecherinnen/Co-Sprecher und die weiteren, beteiligten Institutionen):

Co-Sprecher/in	Zugehörige Institution
Prof. Dr. Roland Scheer roland.scheer@physik.uni-halle.de	Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg Von-Seckendorff-Platz 1 06120 Halle
Prof. Dr. Miguel A. L. Marques miguel.marques@physik.uni-halle.de	Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg Karl-Freiherr-von-Fritsch-Straße 3 06120 Halle
Prof. Dr. Ingrid Mertig ingrid.mertig@physik.uni-halle.de	Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg Von-Seckendorff-Platz 1 06120 Halle
Dr. Christian Hagendorf christian.hagendorf@csp.fraunhofer.de	Fraunhofer-Center für Silizium-Photovoltaik CSP Otto-Eißfeldt-Straße 12 06120 Halle
Dr. rer. nat. Akash Bhatnagar akash.bhatnagar@physik.uni-halle.de	Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg Karl-Freiherr-von-Fritsch-Straße 3 06120 Halle
Prof. Dr. A. Wouter Maijenburg wouter.maijenburg@chemie.uni-halle.de	Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg Karl-Freiherr-von-Fritsch-Straße 3 06120 Halle