



INFORMATIONSTECHNOLOGIE

WASSERSTOFFTECHNOLOGIE

BATTERIEN

MATERIALIEN
&
NACHHALTIGKEIT

PHOTOVOLTAIK

GESUNDHEIT

LEICHTBAU

BIOÖKONOMIE

MATERIALFORSCHUNGSSTRATEGIE DER HELMHOLTZ-GEMEINSCHAFT

Stand April 2021

VORWORT	5
I. MATERIALFORSCHUNG IN DER HELMHOLTZ-GEMEINSCHAFT	6
II. ZIELSETZUNG DER MATERIALFORSCHUNGSSTRATEGIE	8
III. BETEILIGTE FORSCHUNGSBEREICHE UND DEREN KOMPETENZEN IN DER MATERIALFORSCHUNG	10
Materialforschung im FB Information	12
Materialforschung im FB Materie	14
Materialforschung im FB Energie	16
Materialforschung im FB Luftfahrt, Raumfahrt und Verkehr (LRV)	19
Materialforschung im FB Erde und Umwelt	20
Materialforschung im FB Gesundheit	21
IV. IMPLEMENTIERUNG DER HELMHOLTZ-MATERIALFORSCHUNGSSTRATEGIE	22
Struktur und Vernetzung	23
Innovation und Transfer	24
Talentförderung	26
Förderinstrumente	27
V. SCHWERPUNKTTHEMEN UND PLATTFORMEN DER HELMHOLTZ-MATERIALFORSCHUNG	28
Querschnittsthema „Materialien und Nachhaltigkeit“	30
Schwerpunktthema „Materialien in der Informationstechnologie“	33
Schwerpunktthema „Batteriematerialien“	36
Schwerpunktthema „Materialien für die Wasserstofftechnologie“	40
Schwerpunktthema „Photovoltaische Materialien“	44
Schwerpunktthema „Materialien für die Gesundheit“	48
Schwerpunktthema „Biobasierte- und -inspirierte Materialien in der Bioökonomie“	53
Schwerpunktthema „Materialien für Leichtbau“	57
Methoden-Plattform „Beschleunigte Materialentwicklung“	61
Methoden-Plattform „Korrelative Multi-Methoden Materialcharakterisierung“	64
VI. FORSCHUNGSINFRASTRUKTUREN UND GROSSGERÄTE	68
Synthese und Strukturierung von Materialien	68
Charakterisierung von Materialien	70
Virtualisierung und Simulation von Materialien	74
Zukünftige Forschungsinfrastrukturen	76
ABKÜRZUNGSVERZEICHNIS	80
IMPRESSUM	83

Vorwort

Die Materialforschungsstrategie der Helmholtz-Gemeinschaft stellt die mittel- und langfristigen strategischen Ziele zur Entwicklung neuer und verbesserter Materialien dar. Zu diesen Materialien gehören sowohl Nanomaterialien als auch Struktur- und Funktionswerkstoffe zur Lösung drängender gesellschaftlicher Fragestellungen, wie z.B. Materialien für die Energiewende (Solarzellen, Stromspeicher, Brennstoffzellen und Wasserstofftechnologie), den Leichtbau sowie die Informationstechnologie, bis hin zu innovativen Materialien für die Gesundheitsforschung. Dabei soll die gesamte Wertschöpfungskette vom Material bis zum System adressiert werden.

Die programmatische Forschung, vor allem in den Forschungsbereichen (FB) Information, Materie und Energie bildet das Rückgrat für die strategische Positionierung der Helmholtz-spezifischen Materialforschung. Weitere wichtige Beiträge kommen aus den FB Luftfahrt, Raumfahrt und Verkehr, Gesundheit sowie Erde und Umwelt. Dadurch wird eine zukunftsorientierte und themenübergreifende Entwicklung und Anwendung von neuen Materialien und Charakterisierungsmethoden erzielt. Dafür werden thematische Brücken zwischen den FB in der Helmholtz-Gemeinschaft auf- und ausgebaut und die Kompetenzen in einem Netzwerk FB-übergreifend nutzbar gemacht.

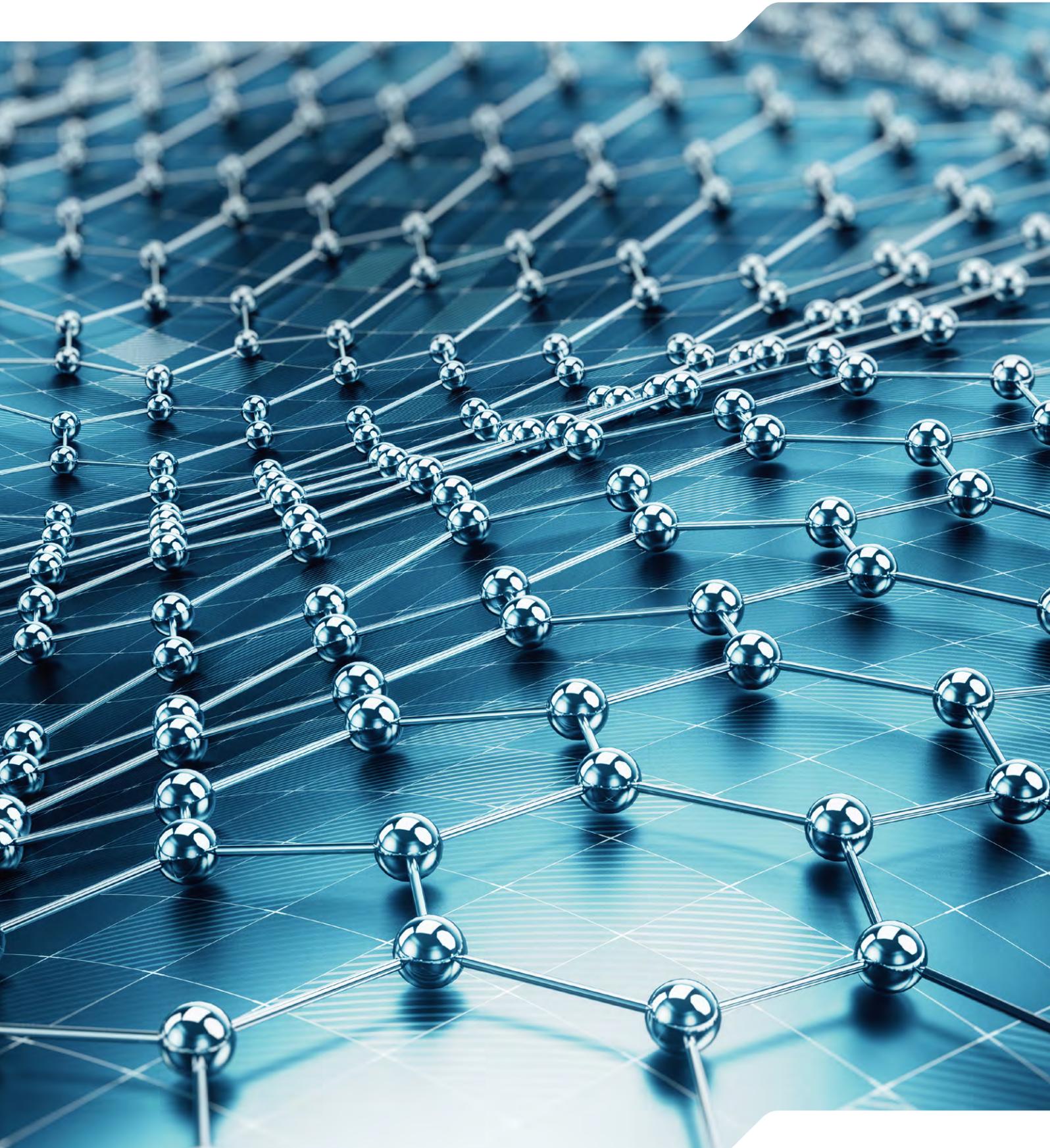
Die Helmholtz-Materialforschung weist die folgenden Alleinstellungsmerkmale im nationalen und internationalen Wissenschaftssystem auf: die Synergieeffekte durch die Kombination der in den einzelnen FB vorhandenen Expertisen, der langfristige, programmatische sowie programm- und forschungsbereichsübergreifende Forschungsansatz und die Nutzung von herausragenden Forschungsinfrastrukturen.

Dargestellt wird zunächst ein Überblick der aktuellen und zukünftigen Ziele der beitragenden Forschungsbereiche auf dem Gebiet der Materialforschung. Hierauf aufbauend werden die Aktivitäten der Helmholtz-Materialforschung in Form von *methoden-orientierten „Plattformen“* und *anwendungsorientierten „Schwerpunktthemen“* aufgezeigt und ein essentieller Bestandteil zur Implementierung der Helmholtz-Materialforschungsstrategie sein.

Die Helmholtz-Gemeinschaft leistet somit zum BMBF-Impulspapier zur Materialforschung einen herausragenden Beitrag und stärkt die internationale Sichtbarkeit und Konkurrenzfähigkeit Deutschlands auf dem Gebiet der Materialforschung. Die Materialforschungsstrategie ist mit den Strategien zur *Digitalisierung* und der *Quantentechnologie* in der Helmholtz-Gemeinschaft eng verzahnt und ergänzt diese inhaltlich.

I. MATERIALFORSCHUNG IN DER HELMHOLTZ-GEMEINSCHAFT

I. MATERIALFORSCHUNG IN DER HELMHOLTZ-GEMEINSCHAFT



Die Materialforschung verbindet interdisziplinäre wissenschaftliche Ansätze aus den Natur- und Ingenieurwissenschaften und stellt somit für eine Vielzahl von gesellschaftlich relevanten Herausforderungen Lösungsoptionen bereit. Insbesondere in den großen Herausforderungen Energiewende, Informations- und Kommunikations-Technologie, Gesundheit, Umweltschutz und Klimawandel hängen wesentliche technologische Innovationen und damit verbundene wirtschaftliche Wertschöpfung und technische Souveränität direkt oder indirekt von Materialien und deren Erforschung, Entwicklung und Optimierung ab. Die Materialforschung schafft damit die Basis für innovative Funktionalität und nachhaltige Nutzung von Bauteilen und Systemen. Voraussetzung hierfür ist die genaue Kenntnis des Aufbaus der Materialien von der atomaren über die mesoskopische bis zur makroskopischen Ebene, der mit höchster zeitlicher und räumlicher Auflösung in der Helmholtz-Gemeinschaft untersucht wird. Damit können mechanische, physikalische, chemische und biologische Eigenschaften eingestellt werden. Mit dem damit einhergehenden zunehmenden grundlegenden Verständnis komplexer Struktur- und Eigenschaftsbeziehungen eröffnet die *Digitalisierung* eine neue Ära des wissensbasierten Materialdesigns mit informationsbasierter Forschung und virtuellem Design zur Entwicklung neuer Materialien und Materialkonzepte entlang des gesamten Lebenszyklus.

Die langfristige programmatische Forschung, vor allem in den Forschungsbereichen (FB) Information, Materie und Energie, bildet das Rückgrat für die strategische Positionierung der Helmholtz-spezifischen Materialforschung. Weitere wichtige Beiträge kommen aus den FB Luftfahrt, Raumfahrt und Verkehr sowie Erde und Umwelt. Für die Gesundheitsforschung verspricht die Schnittstelle von innovativen Materialien und Stammzellforschung bahnbrechende Fortschritte für die Medizin und neue Heilungsmethoden. Wir erzielen eine zukunftsorientierte und themenübergreifende Entwicklung und Anwendung von neuen Materialien und Charakterisierungsmethoden. Dafür werden thematische Brücken zwischen den FB in der Helmholtz-Gemeinschaft auf- und ausgebaut und die Kompetenzen in einem Netzwerk gebündelt mit weiteren Verbindungen zur *Digitalisierungsstrategie*, den Aktivitäten in der Quantentechnologie („*Quanten Roadmap*“) und Wasserstofftechnologie („*Kompetenzatlas Wasserstoff*“) in der Helmholtz-Gemeinschaft. Die hier vorgestellte Materialforschungsstrategie hat vor allem die Vernetzung von methoden- und informationsbasierten Ansätzen der Materialforschung mit den unterschiedlichen Anwendungsgebieten im Blick. Die Helmholtz-Gemeinschaft wird somit, wie im Impulspapier des BMBF zur Materialforschung gefordert, die internationale Sichtbarkeit und Konkurrenzfähigkeit Deutschlands auf dem Gebiet stärken.

II. ZIELSETZUNG DER MATERIALFORSCHUNGSSTRATEGIE

Übergreifend über die Forschungsbereiche bündelt die hier vorliegende Helmholtz-Materialforschungsstrategie die Kompetenzen und Ressourcen der Forschungsbereiche (FB) Information, Materie, Energie, Luftfahrt, Raumfahrt und Verkehr, Gesundheit sowie Erde und Umwelt in der Helmholtz-Gemeinschaft. Ziel ist es, die Materialwissenschaftsaktivitäten der verschiedenen Helmholtz-Zentren und Programme enger zu verschränken, vor allem in Bezug auf verwendete Methoden und konkrete Anwendungen („*Schwerpunktt Themen*“) entlang der großen gesellschaftlichen Fragen, und damit die Sichtbarkeit zu erhöhen. Durch die Partnerschaft der beteiligten Materialforschungszentren (DESY, DLR, FZJ), GSI, HZB, HZDR, HZG, KIT) werden für die Spitzenforschung völlig neue Nutzungsmöglichkeiten in der Materialmodellierung, -synthese und -charakterisierung an einzigartigen Forschungsinfrastrukturen geschaffen und in Zusammenarbeit mit Forschungszentren aus

dem FB Gesundheit auch unter dem Aspekt der *Digitalisierung* und der *Biologisierung*, also der zunehmenden Integration von Prinzipien der Natur in die Material- und Produktentwicklung, ausgebaut. Dies geschieht auf der Basis bestehender Erfahrungen und Kompetenzen der einzelnen FB. Das Forschungsportfolio wird entsprechend strategisch entwickelt – auch durch die Ausgestaltung von FB-übergreifenden Querschnittsaktivitäten in der PoF IV-Periode. Alleinstellungsmerkmale im nationalen und internationalen Wissenschaftssystem der Helmholtz-Materialforschung werden durch die Weiterentwicklung und Nutzung von einzigartigen Großanlagen und Forschungsinfrastrukturen, durch Synergieeffekte zwischen den vielfältigen Expertisen der FB und durch die langfristige, programmatische sowie programm- und forschungsbereichsübergreifende Forschung erzielt.

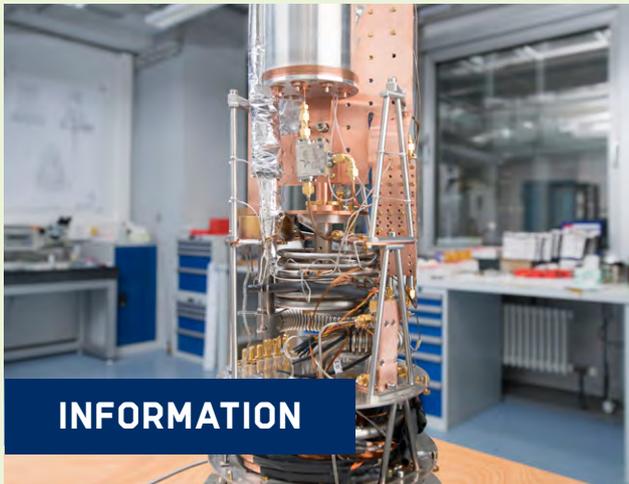
DIE WICHTIGSTEN ZIELE DER HELMHOLTZ MATERIALFORSCHUNGSSTRATEGIE SIND

- die *Digitalisierung der Materialwissenschaft* in der Datenerfassung und im Forschungsdatenmanagement und durch weiteren Ausbau von Simulation und Ansätzen zum „*digitalen Zwilling*“ von Materialsystemen
- die *beschleunigte Entwicklung* von Materialien in den verschiedensten Anwendungen für verbesserte Materialeigenschaften und Nachhaltigkeit
- die Entwicklung und Bereitstellung neuer Hochdurchsatz-Methoden für die *Synthese und Charakterisierung* von Materialien
- der komplementäre Ausbau und die Nutzung der Helmholtz-weiten *Großgeräte und Forschungsinfrastrukturen* für die Materialforschung
- die *Talentgewinnung und -förderung* für den Erhalt und Ausbau der Kompetenzen in Wissenschaft und Industrie
- die Gestaltung von *Technologie- und Wissenstransfer* zur nachhaltigen Bewältigung gesellschaftlicher Herausforderungen in Kooperation über die Forschungsbereiche und mit Partnern in Wirtschaft und Gesellschaft

Es ist offensichtlich, dass der Fortschritt in den materialgetriebenen Innovationen auch einen effizienten Transfer von Forschungs- und Entwicklungsergebnissen über die gesamte Kette vom atomaren Aufbau bis hin zum komplexen Materialsystem und Bauteil im Einsatz benötigt. Entsprechend ist es eine zentrale Aufgabe der Materialforschungsstrategie, die Basis für umfassende Zusammenarbeiten der beteiligten Partner zu erweitern und durch erzeugte Synergien in der Materialforschung die Helmholtz-Gemeinschaft gezielt als Forschungs- und Technologiepartner in anwendungsbezogenen Kooperationen zu etablieren. Somit werden einerseits Instrumente und Methoden für modernste Materialentwicklung erstellt und Kooperationspartnern zugänglich gemacht („*Methodenplattformen*“). Andererseits werden aber auch die Anforderungen entlang der gesamten Wertschöpfungskette inklusive notwendiger Bestrebungen zur *Nachhaltigkeit* von der Entwicklung über die Synthese und Charakterisierung bis hin zum marktreifen Produkt im Verbund und in der Kooperation mit nationalen und internationalen Forschungseinrichtungen bearbeitet. Die wissenschaftliche Gewinnung

von Erkenntnis, die Entwicklung neuer Technologien und Verfahren und die einmaligen Infrastrukturen der Helmholtz-Gemeinschaft sind die Grundlage für den intensiven Dialog mit der Industrie, über den die Ergebnisse der Materialforschung der Helmholtz-Gemeinschaft wirtschaftlich umgesetzt werden (Technologietransfer). Gleichzeitig erlaubt der Dialog mit Gesellschaft und Politik eine Rahmensetzung für neue Materialien und Anwendungen.

III. BETEILIGTE FORSCHUNGSBEREICHE UND DEREN KOMPETENZEN IN DER MATERIALFORSCHUNG



Die Helmholtz-Gemeinschaft stellt als Wissenschaftsorganisation mit 19 naturwissenschaftlich-technischen und medizinisch-biologischen Forschungszentren in den unterschiedlichsten Bereichen Expertise in der Materialwissenschaft bereit. Dies umfasst insbesondere die großen Infrastrukturen zur Materialcharakterisierung, Modifizierung, und Simulation, die wissenschaftliche Expertise zur Materialsynthese, theoretische Ansätze der *Digitalisierung* der Materialwissenschaft sowie die Werkstofftechnik als wichtige Grundlage der Technologieentwicklung in den Anwendungsdomänen wie Energie, Mobilität und Information. Diese sich ergänzenden Expertisen sind in den verschiedenen Forschungsbereichen (FB) und Programmen strategisch aufgestellt.

Der FB Information wird im Rahmen der PoF IV als zentrale Verknüpfung von *Materialforschung*, *Digitalisierung* und *Biologisierung* ausgestaltet („informations-getrieben“). Im FB Materie werden mit den verfügbaren

großen Forschungsinfrastrukturen Materialien gezielt modifiziert und spezifische Aspekte der Synthese und Charakterisierung von Materialien und Aufklärung von Struktur-Eigenschaftsbeziehungen und Dynamik betrachtet („methoden-getrieben“). Komplementär dazu leistet die Materialwissenschaft und Werkstofftechnik in den FB Energie sowie Luftfahrt, Raumfahrt und Verkehr (LRV), aber auch in den FB Gesundheit und Erde und Umwelt wesentliche Beiträge zur spezifischen Technologieentwicklung („anwendungs-getrieben“) wie in Abbildung 1 dargestellt.

Im Folgenden werden die Kernkompetenzen der FB Information, Materie und Energie sowie die Infrastrukturen ausführlich dargestellt, um die bereits vorhandenen Voraussetzungen für eine Helmholtz-weite Materialforschung aufzuzeigen. Die Verknüpfungspunkte zur Materialforschung in den FB Erde und Umwelt (EuU), Gesundheit sowie LRV werden kurz beschrieben.

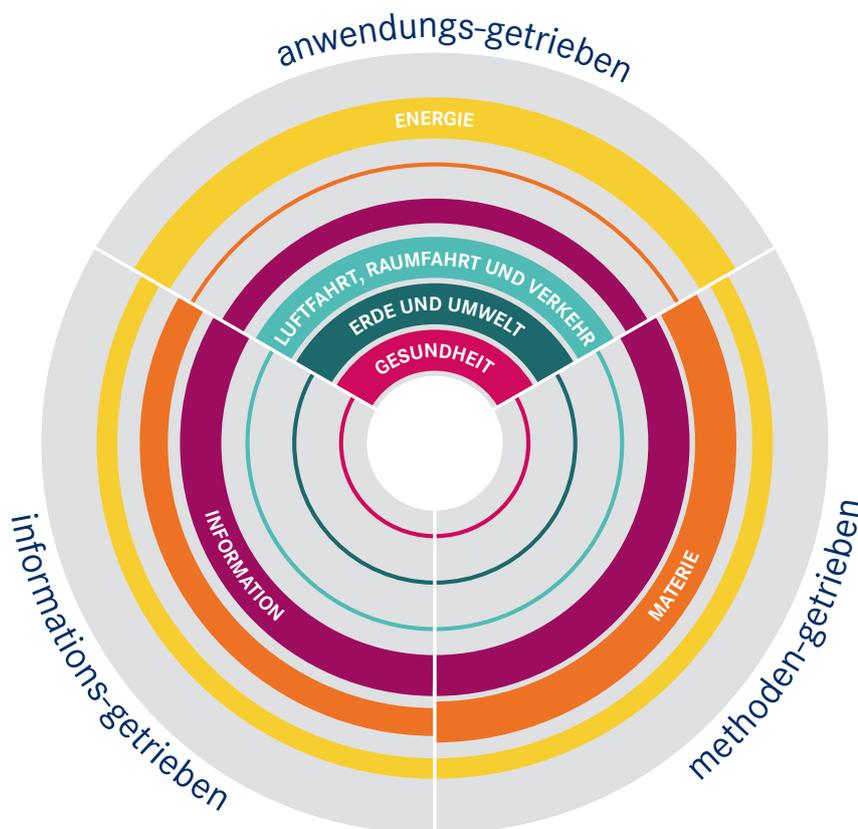
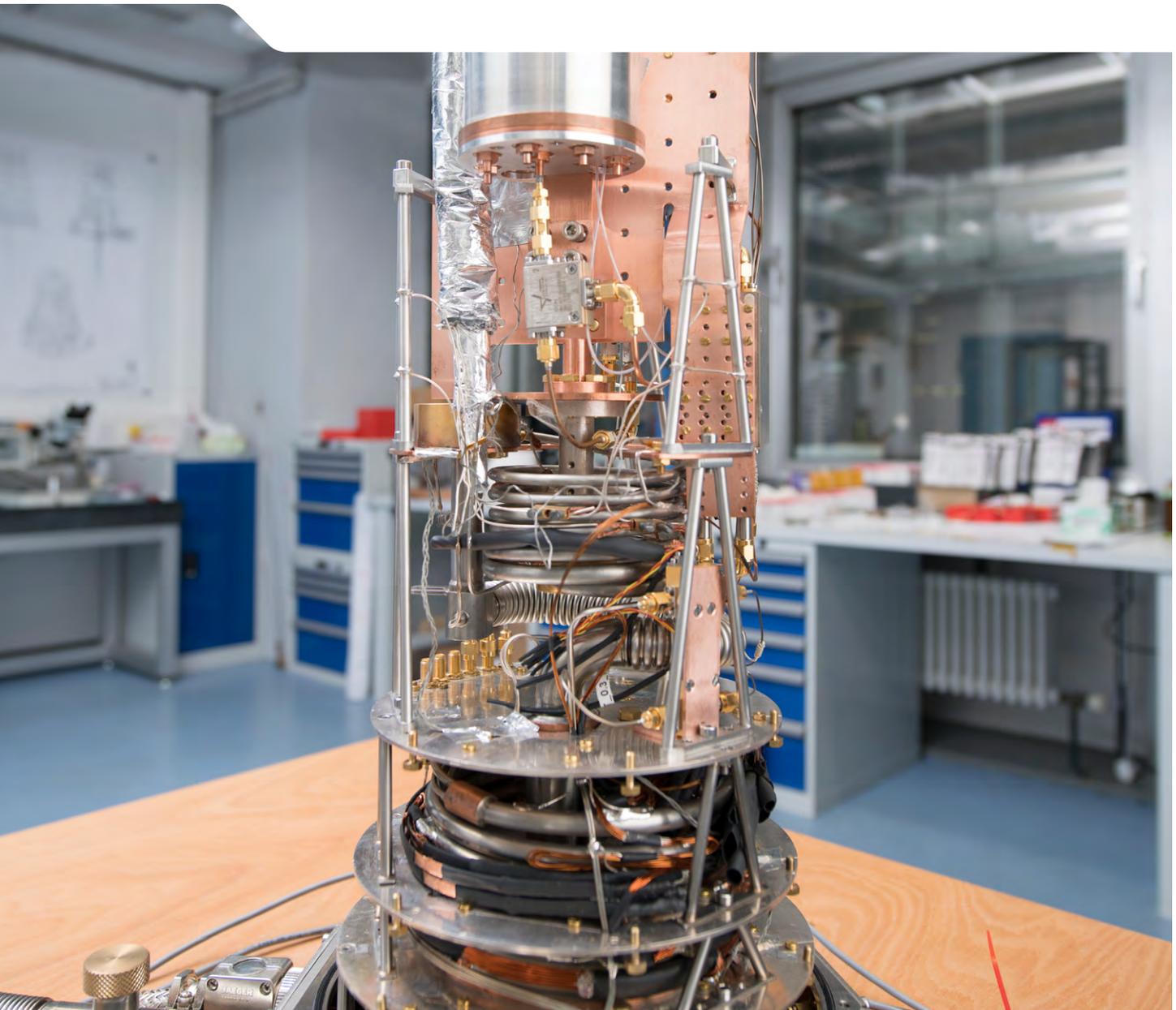


Abb. 1: Materialforschung in der Helmholtz-Gemeinschaft – Komplementäre Kernkompetenzen der Forschungsbereiche.

MATERIALFORSCHUNG IM FB INFORMATION

Im Forschungsbereich (FB) Information werden Methoden zum Design neuer Materialien generisch entwickelt und anhand ausgewählter Anwendungen validiert, zu denen Stofftrennungs- und Speichertechnologien, Photonik, Leichtbau, Informationstechnologie und Medizin gehören. Mit der Betrachtung der Wertschöpfungskette vom Material bis zum System wird ein besonderer Schwerpunkt auf künstliche und biologische Informationssysteme und -technologien gelegt. Der Forschungsbereich entwickelt Prozesse zur Materialsynthese und -strukturierung auch

in Reinrauminfrastrukturen und stellt dedizierte Charakterisierungsmethoden inklusive *in situ* und *operando* Beobachtungen im Bereich der Elektronenmikroskopie und Spektroskopie bereit. Zudem wird auf eine digitale smarte Prozesstechnik z.B. für Halbzeuge aus innovativen Leichtbauwerkstoffen oder Materialien für die Medizintechnik fokussiert. Zusammengenommen führt dies zu der Entwicklung „digitaler Zwillinge“, die den gesamten Lebenszyklus eines Materialsystems umfassen sollen.



Die Aufgabe des Forschungsbereichs Information ist es, methoden- und technologieorientiert Grundlagen für die digitale Transformation von Wissenschaft, Wirtschaft und Gesellschaft zu schaffen. In der PoF IV wird im Forschungsbereich Information nutzeninspirierte Grundlagenforschung mit einem spezifischen Forschungsportfolio betrieben werden (siehe nachfolgende Beschreibungen der Programme). Die hierfür im Forschungsbereich Information verorteten Material- und Neurowissenschaften wirken dabei als Grundlage, Treiber und gleichzeitig als Anwendungsfelder der Informationstechnologie.

PROGRAMM „ENGINEERING DIGITAL FUTURES: SUPERCOMPUTING, DATA MANAGEMENT AND INFORMATION SECURITY FOR KNOWLEDGE AND ACTION“

Das Hauptziel besteht darin, Lösungen für die methodologischen, technischen, instrumentellen, organisatorischen und gesellschaftlichen Herausforderungen zu entwickeln, mit denen moderne Wissenschaft, Technik, Industrie und Gesellschaft im Zeitalter der digitalen Transformation konfrontiert sind. Wichtig sind die Entwicklung neuartiger Methoden und Werkzeuge zur Simulation und Datenanalyse sowie der Aufbau und Betrieb strategischer Infrastrukturen, insbesondere im Hinblick auf Exascale-Computing, für deren Erprobung die Materialforschung ein wichtiges Anwendungsfeld darstellt und auf einen deutlich stärkeren Schwerpunkt auf dem Gebiet der Forschung zu IT-Sicherheit. Ergänzt werden diese Anstrengungen, die auf exzellenter Informatik und Informationstechnik basieren, durch begleitende Ansätze, um hierbei die gesellschaftlichen Innovationspotentiale, Wertschöpfungsketten, Akzeptanzfragen, aber auch mögliche Risiken ganzheitlich in den Blick zu nehmen.

PROGRAMM „NATURAL, ARTIFICIAL AND COGNITIVE INFORMATION PROCESSING“

Das Programm hat eine koordinierende Rolle in verschiedenen Initiativen, die sich den großen Herausforderungen der fortschreitenden *Digitalisierung* stellen. Durch die Erforschung der verbindenden Elemente von unbelebter Materie und biologischen Systemen (inklusive des menschlichen Gehirns) soll ein umfassendes Verständnis der grundlegenden Regeln von Informationsverarbeitung erreicht werden, um dieses dann so anzupassen, dass für die nächste Generation von Computersystemen neue Prinzipien entwickelt werden können. Dazu gehören insbesondere die Themen Energieeffizienz als Technologietreiber,

selbstlernende neuromorphe Systeme als Basis für die Realisierung von Industrie 4.0 und von autonomen Systemen sowie die Quantenmaterialien und das Quantencomputing für die Berechnung komplexer Systeme und mit potenziellen Anwendungen in vielen anderen Bereichen (z.B. zur Verbesserung der Datensicherheit, Kommunikation oder Metrologie). Die Koordination dieser Forschungsfelder in einem Programm eröffnet einmalige Chancen des Wissensertransfers und der interdisziplinären Zusammenarbeit. So ist das Programm von zentraler Bedeutung für die lebenswissenschaftliche Grundlagenforschung des Forschungsbereichs und deren Brückenschlag hin zur Integration biologischer Prinzipien in technische Lösungen.

PROGRAMM „MATERIALS SYSTEMS ENGINEERING“

Zielsetzung ist es, auf Basis von experimentellen und theoretischen Arbeiten die Transformation zu einer virtuellen und datengetriebenen Materialforschung voranzutreiben, um (i) die *Digitalisierung* der Materialwissenschaft und Werkstofftechnik durch Erzeugung digitaler Abbilder der Materialien, der relevanten Prozesse und Anwendungen zu ermöglichen und durch prädiktive Ansätze zu beschleunigen, sowie (ii) die Erforschung und Simulation multifunktionaler Materialsysteme über die gesamte Prozesskette bis zur Translation (Lebenszyklusanalyse) zu realisieren. Das Spektrum der zu untersuchenden Materialsysteme umfasst sowohl die atomare und molekulare Ebene als auch aktive und responsive Hybrid- bzw. Verbundwerkstoffe, photonische Materialien, smarte bioaktive Werkstoffe und hierarchisch organisierte, skalenüberschreitend konzipierte Materialsysteme mit ggf. spezifischen Funktionalitäten.

Durch die virtuelle und datengetriebene Materialentwicklung sowie in Verbindung mit einem einheitlichen Datenmanagementkonzept soll mittel- bis langfristig eine inverse Materialentwicklung ermöglicht werden, d. h. eine rationale Ableitung von Materialeigenschaften aus den am Markt geforderten Produkteigenschaften, unter expliziter Berücksichtigung der *Nachhaltigkeit* der Materialien (Lebenszyklusanalyse). Hierbei werden auch die Aktivitäten der BMBF-Initiative „*MaterialDigital*“ miteingebunden. Die Materialwissenschaft wird zum Motor einer schnellen Weiterentwicklung der Informationsverarbeitungstechnik (vollautomatisierte Strukturanalyse, datengetriebene Materialentwicklung) sowie der Modellierung und Simulation (*ab initio* Rechnung, molekuldynamische Simulation, Multiskalensimulation).

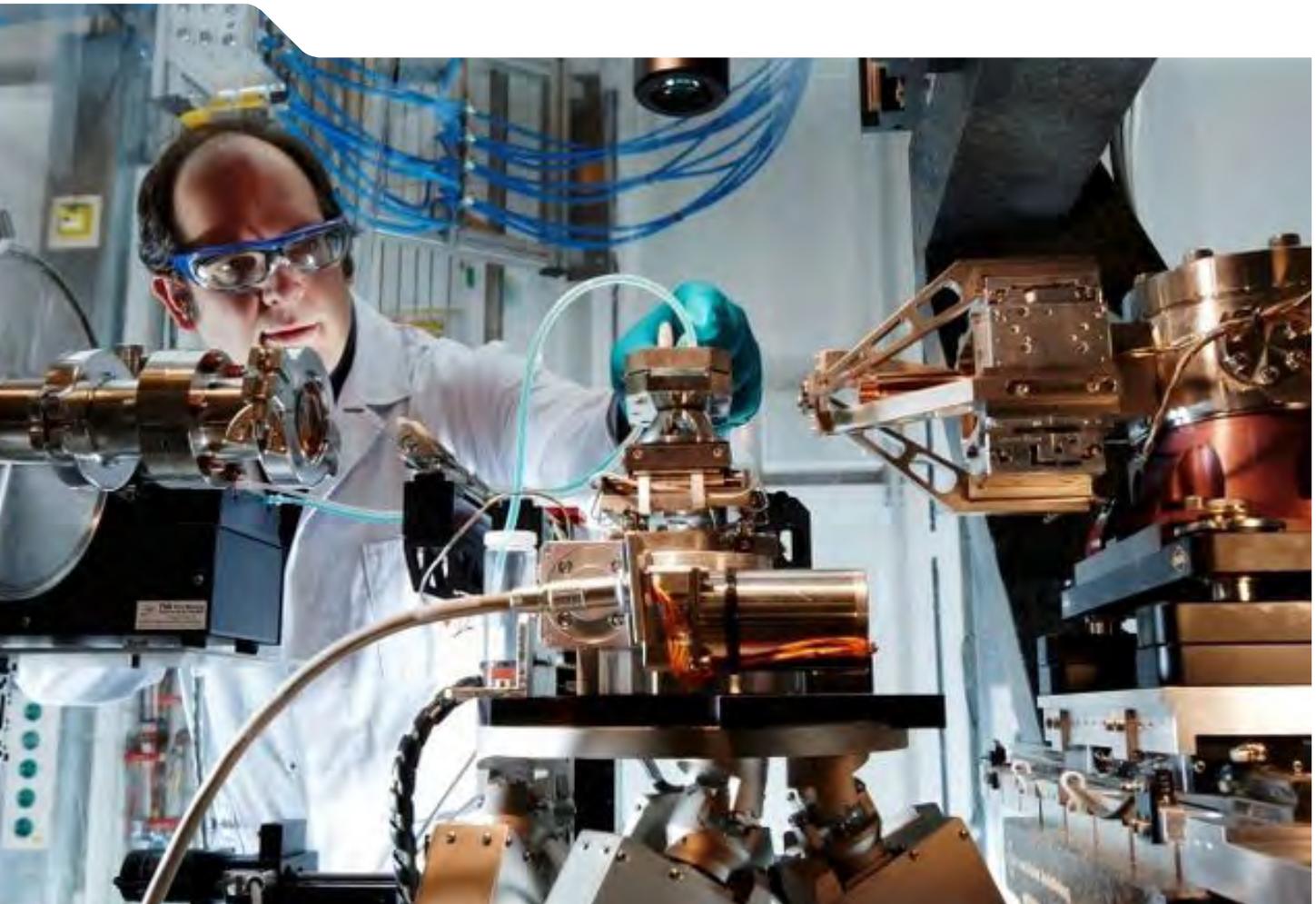
MATERIALFORSCHUNG IM FB MATERIE

Der Forschungsbereich Materie verfügt über besondere Kompetenzen bei Entwicklung, Bau, Betrieb und Nutzung von großen Forschungsinfrastrukturen für disziplinübergreifende Fragestellungen zur Charakterisierung, Modifikation und Synthese von Materialien. Dabei geht es vor allem darum, ein vertieftes, mikroskopisches Verständnis von Materie, Materialien und biologischen Systemen zu erhalten. Bei den herausragenden Forschungsinfrastrukturen des FB Materie handelt es sich unter anderem um Großgeräte, die Photonen, Neutronen und Ionenstrahlen sowie höchste elektromagnetische Felder zur Verfügung stellen.

Vor allem im **PROGRAMM „VON MATERIE ZU MATERIALIEN UND LEBEN“ (MML)** steht die Materialcharakterisierung und Untersuchung von Struktur-Eigenschaftsbeziehungen im Mittelpunkt. Die oben genannten

Forschungsinfrastrukturen erlauben u.a. Untersuchungen auf extrem kurzen bis zu atomaren Längen- und Zeitskalen. Im MML Programm werden die detaillierte Struktur und die elektronischen, optischen, magnetischen und chemischen Eigenschaften von Materie und Materialien sowie elektronische, katalytische und (bio-)chemische Prozesse erforscht. Unter gezielter Nutzung der MML-Großgeräte und deren diagnostischen Möglichkeiten erfolgen diese Untersuchungen auf allen relevanten Längen- und Zeitskalen. Vertiefte Kenntnisse über diese Prozesse durch *in situ* und *operando* Studien und ihre Kontrolle dienen dazu, funktionale Materialien und Werkstoffe für neuartige Bauelemente und Anwendungen zu entwickeln.

Aktivitäten im **PROGRAMM „MATERIE UND TECHNOLOGIEN“ (MT)** betrachten Entwicklungen von Halbleiterdetektoren, basierend auf Silizium aber auch Diamant und



anderen, Materialien. Diese mikro- und auch nanostrukturierten Detektoren erlauben es, hohe räumliche Auflösungen zu erreichen, um z. B. Streubilder komplizierter Systeme an Synchrotronstrahlungsquellen und FELs oder aber Signale bei allerhöchsten Zählraten und mit Pikosekunden-Zeitauflösung aufzuzeichnen, wie sie bei den zukünftigen Experimenten mit höchsten Raten an Beschleunigern auftreten.

Dank der Interdisziplinarität der Materialforschungsaktivitäten des FB Materie existieren thematische Brücken zu anderen Forschungsbereichen. Zum Beispiel wird an den Ionenbeschleunigeranlagen des FB Materie die Strahlbeständigkeit von Weltraumelektronik und Materialien untersucht, die im FB LRV entwickelt und angewendet werden. Erforschung von fundamentalen Fragen zum Verhalten von Materie und Materialien unter extremen Bestrahlungs- und Druckbedingungen sind für die Anwendung von Materialien in Fusionsreaktoren oder für die sichere Lagerung von radioaktivem Abfall relevant und öffnen einen neuartigen Weg zur Synthese neuen Materialien. Eine Brücke zum FB

Gesundheit steht u.a. mit Untersuchungen der Dynamiken von strukturellen Änderungen in Bio-Molekülen, und mit der Entwicklung von Bio- und chemischen Sensoren im Bereich Nanotechnologie oder mit der Tumorthherapie mittels Ionenstrahlen. Materialien für die Energiewende (z.B. im Bereich Katalyse, Wasserstoff, Thermoelektrik, und Batterien) werden innerhalb des FB Materie an verschiedenen Photonen-, Neutronen- und Ionen-Großgeräten hergestellt und charakterisiert, was wiederum die Aktivitäten im FB Energie unterstützt. Ähnliches gilt für Quantenmaterialien für zukünftige Anwendungen in der Informationstechnologie, die auch im FB Information untersucht werden. Zu all dem bedarf es auch Strategien für das Management und die Analyse von großen Datenmengen. Auch hier spielt die Brücke zum FB Information, vor allem auch innerhalb der geplanten Querschnittsaktivitäten zur Materialcharakterisierung eine gewichtige Rolle.

MATERIALFORSCHUNG IM FB ENERGIE

Der Forschungsbereich Energie erforscht Materialien und Technologien für die Energiewende. Er beschäftigt sich dabei mit Materialforschungs- und Werkstofftechnik als wesentlicher Basis neuer Technologien zur effizienten Energiewandlung, -speicherung und -nutzung. Dazu gehören auch FB-übergreifende Materialsynthese-Einrichtungen und Charakterisierungsplattformen, an denen sich der FB Energie aktiv beteiligt.

Fragen der Materialforschung – von neuen Materialkonzepten über deren Synthese bis zur Untersuchung ihrer Zuverlässigkeit – sind im FB Energie integraler Teil der Technologieentwicklung und ermöglichen Innovationssprünge bei den entsprechenden Energietechnologien. Ziele hierbei sind vor allem angemessene Lebensdauern und die Steigerung der Energieeffizienz sowie die umweltfreundliche Energiebereitstellung und Kosteneffizienz in der gesamten Themenbreite innerhalb eines Ansatzes der zirkulären Wirtschaft.

Der FB Energie betreibt zu diesem Zweck dedizierte Synthese- und Charakterisierungsplattformen für energierelevante Anwendungen (z.B. Energy Materials Characterization Platform (HEMCP), Helmholtz Energy Materials Foundry (HEMF) oder Energy Materials *in situ* Laboratory (EMIL@BESSY II)). Darüber hinaus werden methodische Entwicklungen in den Forschungsbereichen Information und Materie genutzt und neben der gezielten eigenen Weiterentwicklung von Charakterisierungs- und Modellierungsmethoden im Bereich der Materialentwicklung für die verschiedenen Energietechnologien eingebracht.



Ein erfolgreiches Beispiel ist der schnelle Aufbau einer zunächst grundlagenorientierten Forschung im FB Information zum Thema der elektrochemischen Energiespeicherung mit der darauffolgenden Übertragung in eine auf einzelne Technologien bezogene Forschung im FB Energie. Zur Stärkung der Themen Photovoltaik und Katalyse wurde in Hinblick auf die PoF IV ähnlich vorgegangen. Generell gewährleisten die Schnittstellen zwischen den Forschungsbereichen auch, dass entwickelte Methoden, z.B. zum oben diskutierten virtuellen Materialdesign oder Methoden der Materialcharakterisierung, verstärkt in der anwendungsbezogenen Forschung eingesetzt werden.

PROGRAMM „MATERIALIEN UND TECHNOLOGIEN FÜR DIE ENERGIEWENDE“ (MTET)

Die Ziele der Energiewende umfassen neben der massiven Erhöhung des Anteils der erneuerbaren Energien auch eine deutliche Steigerung der Effizienz bei der Erschließung, Bereitstellung und Nutzung von Energieressourcen sowie mineralischer und metallhaltiger Ressourcen. Daher bedarf es zum einen innovativer Technologien, um die verschiedenen regenerativen Energiequellen effizient und kostengünstig zu erschließen sowie in zentralen und dezentralen Anwendungen optimal zu nutzen. Zum anderen ist eine intensive Forschung und Entwicklung zur effizienten Speicherung in Batterien, zur Erzeugung und Nutzung von Wasserstoff sowie der gesamten Spannweite der Power-to-X-Technologien einschließlich der Nutzung von CO₂ erforderlich, um das zukünftige Energiesystem frei von fossilen Energieträgern und nachhaltig, das heißt umweltverträglich, zuverlässig, bedarfsgerecht und bezahlbar zu gestalten.

Das Programm bezieht vielfältige technologische Optionen von den wissenschaftlichen Grundlagen für disruptive Innovationen bis hin zur zeitnahen Anwendung neuer Technologien ein. Für alle technologischen Optionen sind kostengünstige Materialien mit hoher Leistungsfähigkeit die Voraussetzung.

Das Programm MTET betrachtet in den folgenden fünf Programmenthemen (Topics) technologische Optionen:

- Photovoltaik- und Windenergie
- Elektrochemische Energiespeicherung
- Chemische Energieträger
- Hochtemperaturtechnologien
- Ressourcen- und Energieeffizienz

Die Materialforschung und -entwicklung ist dabei integraler Teil der jeweiligen Topics, so dass die verschiedenen Technologien in einer Prozesskette von der Materialforschung bis zur Anwendung in enger Abstimmung der beteiligten Gruppen bearbeitet werden.

PROGRAMM „FUSION“ (FUSION)

Das Programm Fusion befasst sich mit den physikalischen Aspekten und den benötigten Technologien und Materialien für Bau und Betrieb von Fusionsexperimenten und zukünftigen Fusionsreaktoren.

Das Topic 3 „Technologien und Materialien für die Fusion“ umfasst Entwicklungen von Technologien und Materialien für bestehende (Wendelstein 7-X), im Bau befindliche (JT-60SA, ITER) und zukünftige Fusionsanlagen (DEMO). In ITER und DEMO werden in großem Umfang Fusionsreaktionen realisiert, woraus sich neue Herausforderungen bei den einzusetzenden Materialien insbesondere im Hinblick auf Neutronenreaktionen ergeben. Da das Verständnis und die Kontrolle der Plasma-Wand-Wechselwirkung entscheidend für den effizienten Betrieb eines Fusionskraftwerks sind, sind auch zentrale Fragestellungen in Topic 4 „Plasma-Wand-Wechselwirkung“ eng verbunden mit Materialaspekten, insbesondere die Wahl und Charakterisierung der Wandmaterialien.

Fusionsanlagen stellen extreme Bedingungen an Struktur- wie Funktionsmaterialien (u.a. hohe Temperaturen, Drücke und Magnetfelder, hochenergetische Neutronen, zyklische Wechsellasten), die neben einer geringen Aktivierbarkeit gleichzeitig hohe Betriebsdauer und Zuverlässigkeit garantieren sollen. Dies übersteigt die Grenzen der Weiterentwicklung konventioneller Werkstoffe und erfordert innovative Werkstoffkonzepte, um sowohl die technische Leistungsfähigkeit zu gewährleisten, als auch Nachhaltigkeits- und Umweltaspekten Rechnung zu tragen.

Erfolgreiche Beispiele dieser seit Jahren verfolgten Strategie sind Hochtemperatur-Supraleiterkabel und Stromzuführungen, duktiles Wolfram, Diamantfenster, gradierte Wolframschutzschichten und additive Fertigungsprozesse, deren Entwicklung nicht nur die Fusion weiter nach vorne gebracht hat, sondern Anwendungsbereiche weit über die Fusion hinaus erschließen kann.

PROGRAMM „NUCLEAR WASTE MANAGEMENT, SAFETY AND RADIATION RESEARCH“ (NUSAFE)

Das Programm NUSAFE beinhaltet grundlegende und angewandte Forschungsarbeiten zur sicheren nuklearen Entsorgung in geologischen Tiefenlagern und liefert einen (radio-)geochemischen und (radio-)biogeochemischen Beitrag zu Standortauswahl und -charakterisierung. Darüber hinaus untersucht es innovative Entsorgungsstrategien für die Stilllegung kerntechnischer Anlagen und zur Behandlung radioaktiver Abfallströme.

Die materialwissenschaftliche Forschung in NUSAFE umfasst die Untersuchung radioaktiver Materialien an Forschungsinfrastrukturen sowie die Aufklärung des Verhaltens von Konstruktionswerkstoffen unter reaktortypischen Bedingungen. Hier werden im Bereich Material- und Komponentensicherheit beispielsweise ODS-Stähle untersucht.

MATERIALFORSCHUNG IM FB LUFTFAHRT, RAUMFAHRT UND VERKEHR (LRV)

Im Fokus des FB LRV steht die Optimierung bestehender und die Entwicklung neuer Materialien für Hochleistungsleichtbaustrukturen für sichere und wirtschaftliche Luft- und Raumfahrzeuge. Ziele sind dabei die Verbesserung der Wirtschaftlichkeit und der Sicherheit im Zusammenspiel mit der Reduktion des Footprints der klimaschädlichen Emissionen. Die Forschungsarbeiten adressieren dabei neue metallische Legierungen und keramische Verbundwerkstoffe für den Hochtemperatureinsatz in Antriebssystemen und neue Leichtmetalle und polymere Composites für Luft- und Raumfahrtstrukturen. In diesem Zusammenhang eröffnet der 3D-Druck neue Designoptionen, fordert aber auch die Entwicklung von neuen, an das Verfahren angepassten Werkstoffen der genannten Materialklassen. Die Herstellverfahren der Verbundwerkstoffe und der 3D-Druck erfordern den Einbezug aller Prozessschritte, vom Basismaterial bis hin zur automatisierten Produktion. Nur so kann das komplexe Material optimale strukturelle-mechanischen Leistungen in der Zielstruktur erbringen. Die

wissenschaftlichen Arbeiten dazu erstrecken sich von der Simulation des Materials und seinen Eigenschaften auf Atom- und Gefügebene, der Auslegung und Berechnung von Strukturen, der digitalen Integration der einzelnen Prozessschritte entlang der gesamten Prozesskette und die experimentelle Validierung der Simulationskette. Der physische Nachweis wird konsequent in den Full-Scale-Bereich bis zur Größe eines Rumpfsegments erweitert. Ziel ist zukünftig die digitale Bewertbarkeit von Materiallösungen im Kontext der Struktur eines Gesamtflugzeugs bzw. eines Träger- oder Satellitensystems. In diesem Zusammenhang spielen Zeit und finanzielle Aufwendungen für die Entwicklung neuer Materialien eine zunehmend größere Rolle. Durch die Forschungsarbeiten im Bereich der skalenübergreifenden, digitalen Werkzeuge in Verbindung mit dem zukünftigen Einsatz des Quantencomputers und eines integrierten, digitalen Datenmanagementsystems sollen die Entwicklungszeiten und -kosten um mehr als 50% reduziert werden.



MATERIALFORSCHUNG IM FB ERDE UND UMWELT

Der FB Erde und Umwelt (EuU) untersucht das Erdsystem und dessen nachhaltige Nutzung. Dabei spielen Materialien in vielerlei Hinsicht eine wichtige Rolle: Rohstoffe werden aus Kompartimenten des Erdsystems entnommen und durch und während der menschlichen Nutzung als Rest- und Abfallstoffe in terrestrische, marine und atmosphärische Systeme eingebracht. Persistente Substanzen und im Abbau daraus entstehende Schadstoffe sind heute in allen Regionen und Kompartimenten des Erdsystems zu finden. In der PoF IV hat der Forschungsbereich deshalb auch die nachhaltige Nutzung in den Fokus genommen, um Wege zur umweltschonenden Gewinnung und Nutzung von Rohstoffen für die Materialien im Sinne einer Kreis-

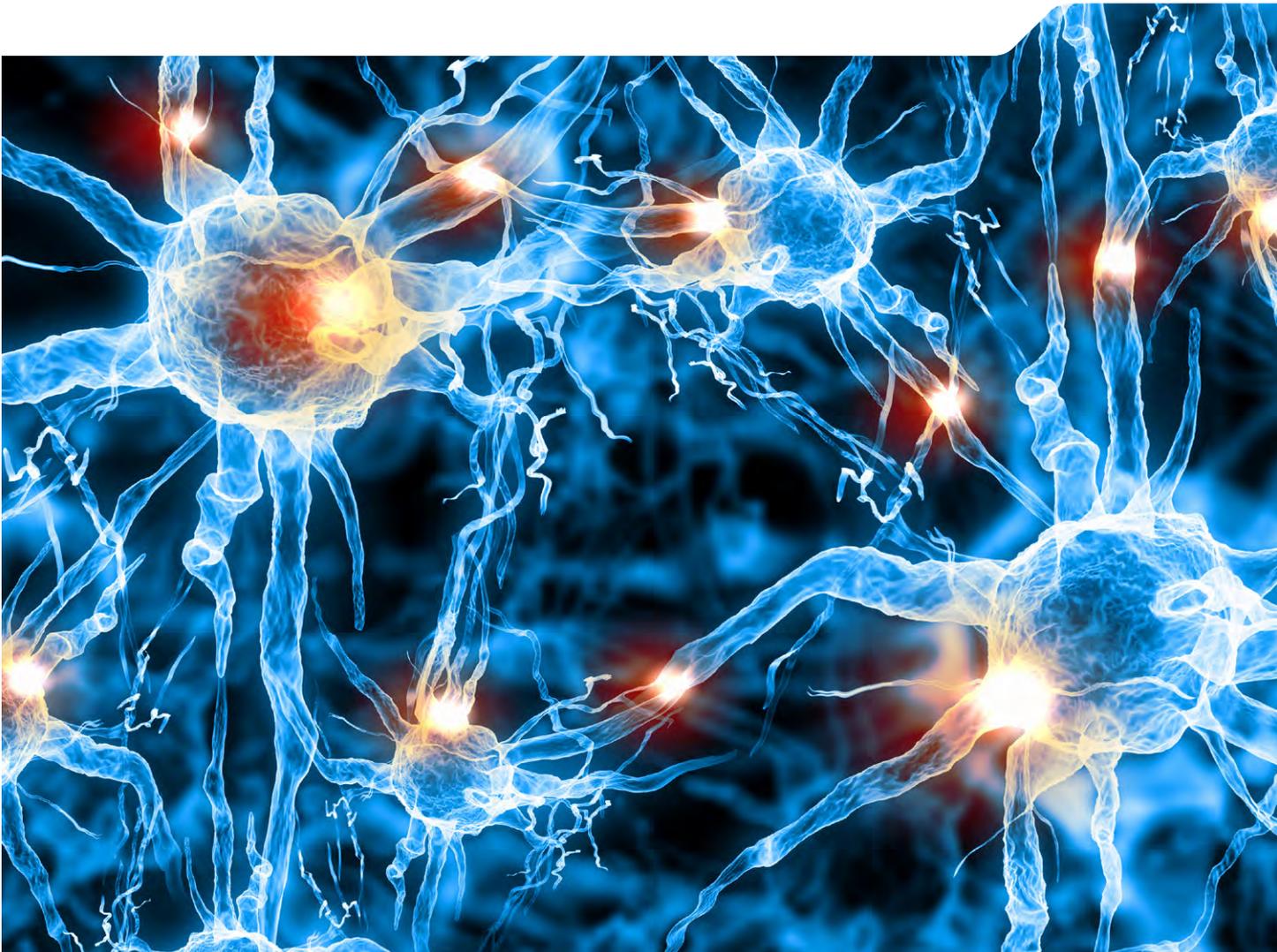
laufwirtschaft zu erforschen, bei der der Schutz der Umwelt integraler Bestandteil des systemischen Ansatzes ist. Bioökonomische Ansätze nutzen Biomasse und Wissen über biologische Systeme auch, um umweltfreundliche Rohstoffe zu erzeugen und biobasierte Materialien zu entwickeln; biotechnologische und bionische Forschung nutzt das Wissen über biologische Systeme, um Materialien mit neuen Eigenschaften zu entwickeln und nachhaltig zu produzieren. Zudem können neue Materialien wichtige Beiträge für den Schutz des Erdsystems erfüllen. Darüber hinaus hat der FB maßgebliche Expertise in der Lebenszyklusanalyse, die auch in die Materialforschung Eingang finden soll.



MATERIALFORSCHUNG IM FB GESUNDHEIT

Der FB Gesundheit erforscht die Ursachen und die Entstehung der großen Volkskrankheiten. Dazu zählen Krebs, Herz-Kreislauf-, Stoffwechsel-, Lungen- und Infektionskrankheiten sowie Erkrankungen des Nervensystems. Die Erforschung komplexer und häufig chronisch verlaufender Krankheiten erfordert interdisziplinäre Ansätze, wie z.B. der Einsatz von neuen Materialien, die die Helmholtz-Zentren gemeinsam mit Partnern aus der Hochschulmedizin, den Universitäten, anderen Forschungsorganisationen und der Industrie vorantreiben. Die Helmholtz-Zentren des Forschungsbereichs Gesundheit bringen ihre exzellente Grundlagenforschung zudem auch in die vom BMBF

initiierten Deutschen Zentren der Gesundheitsforschung ein, um Forschungsergebnisse schneller in die klinische Anwendung zu überführen. Dabei spielt beispielsweise die Erforschung von Nanomaterialien eine wichtige Rolle für die Etablierung von intelligenten Trägersystemen, welche die gezielte Wirkstoffaufnahme verbessern oder überhaupt erst ermöglichen. Die Entwicklung künstlicher Gewebe und Organe an der Schnittstelle von Material- und Stammzellforschung verspricht Durchbrüche für Diagnostik, regenerative Therapie und Prävention im Sinne von personalisierter Medizin.



IV. IMPLEMENTIERUNG DER HELMHOLTZ-MATERIALFORSCHUNGSSTRATEGIE



Die Materialforschung bietet Chancen und schafft aber auch Herausforderungen, denen sich die Helmholtz-Gemeinschaft in den nächsten Jahren mit den hier aufgezeigten Kompetenzen zum Erreichen der gesteckten Ziele widmen wird. Für eine Umsetzung benötigt es die Implementierung unterschiedlichster Maßnahmen sowie einen kontinuierlichen dynamischen Prozess zur

Weiterentwicklung der Forschungsthemen. Bereits jetzt zeigt die Helmholtz-Gemeinschaft in den Forschungsbereichen und darüber hinausgehenden Aktivitäten zusammen mit nationalen und internationalen Partnern ihr großes Potential, das auch auf den einzigartigen Infrastrukturen beruht.

Die Helmholtz-Materialforschungsstrategie zielt darauf, dieses Potential auszubauen und durch interdisziplinäre Ansätze innovative Lösungsbeiträge für die gesellschaftlich und wirtschaftlich drängenden Fragen zu finden. Die Sichtbarkeit der Helmholtz-Materialforschung in der nationalen und internationalen Forschungslandschaft soll dabei durch folgende Eckpunkte weiter erhöht werden:

- Die komplementären Kompetenzen der Forschungsbereiche werden als Basis für die Helmholtz-Materialforschungsstrategie ausgebaut und auf ein hohes Maß an Synergie und gegenseitiger Stärkung übergreifender Arbeitsteilung ausgerichtet.
- Durch den FB-übergreifenden Wissens- und Methodenaustausch sowie den Dialog mit der Gesellschaft und die Zusammenarbeit mit der Industrie wird die Innovationskraft entscheidend gestärkt.
- Die bestehenden und zukünftig geplanten Großgeräte und Forschungsinfrastrukturen der Helmholtz-Gemeinschaft werden umfassend und synergetisch durch die (inter-)nationale Materialforschungs-Community genutzt.

STRUKTUR UND VERNETZUNG

Die Einrichtung eines Helmholtz-weiten Materialforschungs-Netzwerkes wird den FB-übergreifenden Wissensaustausch unterstützen sowie auch zur Sichtbarkeit der Materialforschung der Helmholtz-Gemeinschaft beitragen. Mittels strukturgebender Elemente soll die Forschungslandschaft in Helmholtz und deutschlandweit gestärkt werden, um sich im internationalen Wettbewerb besser zu positionieren. Wesentliche Elemente sind dabei eine FB-übergreifende Dateninfrastruktur, auch als Teil der Nationalen Forschungsdateninfrastruktur (NFDI), sowie eine Übersicht zu verfügbaren Methoden und Ansprechpartnern, wodurch auch Kontakte und Kooperationen mit der Industrie ausgebaut und verstärkt werden.

Die komplementären Arbeiten der Forschungsbereiche (FB) werden zu ausgewählten Themengebieten zusammengeführt und der auf dem Wissensaustausch beruhende Mehrwert für die Bearbeitung in dem jeweiligen weltweit sichtbaren und strategisch relevanten Thema aufgezeigt. Diese ausgewählten Aktivitäten zeichnen sich durch eine kritische Größe aus und werden folgende Funktionen für die FB-übergreifende Materialforschung haben:

- Methodische Entwicklung zum Nutzen von mehreren Topics, Programmen und Forschungsbereichen in Helmholtz.

- Bildung einer FB-übergreifenden, wissenschaftlichen Community innerhalb von Helmholtz (zur gegenseitigen Unterstützung).
- Effiziente Nutzung von Ressourcen in Helmholtz (abgestimmte Nutzung von Infrastrukturen und Planung von großen, einmaligen Anlagen).
- Beantwortung gesellschaftlich relevanter Fragestellungen.

Als Ausgangsszenario sind die Aktivitäten hierbei in zwei **Methoden-Plattformen** und **anwendungsorientierte Schwerpunktthemen** eingeordnet. Die Methoden-Plattformen, „*Beschleunigte Materialentwicklung*“ und „*Korrelative Materialcharakterisierung*“, widmen sich den übergreifenden Fragestellungen der Modellierung/Simulation, Synthese und Prozessierung, sowie Charakterisierung, deren Antworten für eine Vielzahl von Anwendungen wichtig sind. Die im FB Information bereits eingerichteten Joint Labs „*Virtual Materials Design*“ (VMD) und „*Integrated Model and Data driven Material Characterization*“ (MDMC) stellen hierfür einen essentiellen Teil der informations-basierten methodisch-orientierten Integration der Helmholtz-Materialforschungsstrategie dar. Die Schwerpunktthemen „*Materialien für die Informationstechnologie*“, „*Batteriematerialien*“, „*Materialien für die Wasserstofftechnologie*“, „*Photovoltaische Materialien*“, sowie „*Materialien für die Gesundheit*“, „*Biobasierte- und -inspirierte Materialien in der Bioökonomie*“ und „*Leichtbau*“, beschäftigen sich mit der Entwicklung von Materialien entlang der kompletten Wertschöpfungskette von Atom bis zum Materialsystem in konkreten Anwendungen in gesellschaftlich hoch relevanten Themengebieten. Hierfür werden in der PoF IV zusammenhängende Aktivitäten in den jeweiligen Programmen bereits in Topics (wie z.B. die Photovoltaik im FB Energie, Programm Materials and Technologies for the Energy Transition) gebündelt und tragen so auch zur Weiterentwicklung der FB-übergreifenden Materialforschung bei. Bei allen Aktivitäten werden die Nachhaltigkeit und die Kreislaufwirtschaft der Materialien als zentraler Aspekt ebenfalls betrachtet. Der gegenseitige Wissenstransfer und die Zusammenarbeit der Methodenplattformen mit den anwendungsorientierten Schwerpunktthemen bilden die Matrix der Helmholtz-Materialforschungsstrategie (siehe Abbildung 2), die in Kapitel V ausführlich beschrieben ist.

Geplante FB-übergreifende Aktivitäten im Rahmen der PoF IV sind Beispiele für das Entstehen einer Wertschöpfungskette, die von den Kompetenzen der Beteiligten profitiert. Hierzu gehören vor allem die „*Joint Labs*“ innerhalb des Forschungsbereichs Information,

IV. IMPLEMENTIERUNG DER HELMHOLTZ-MATERIALFORSCHUNGSSTRATEGIE

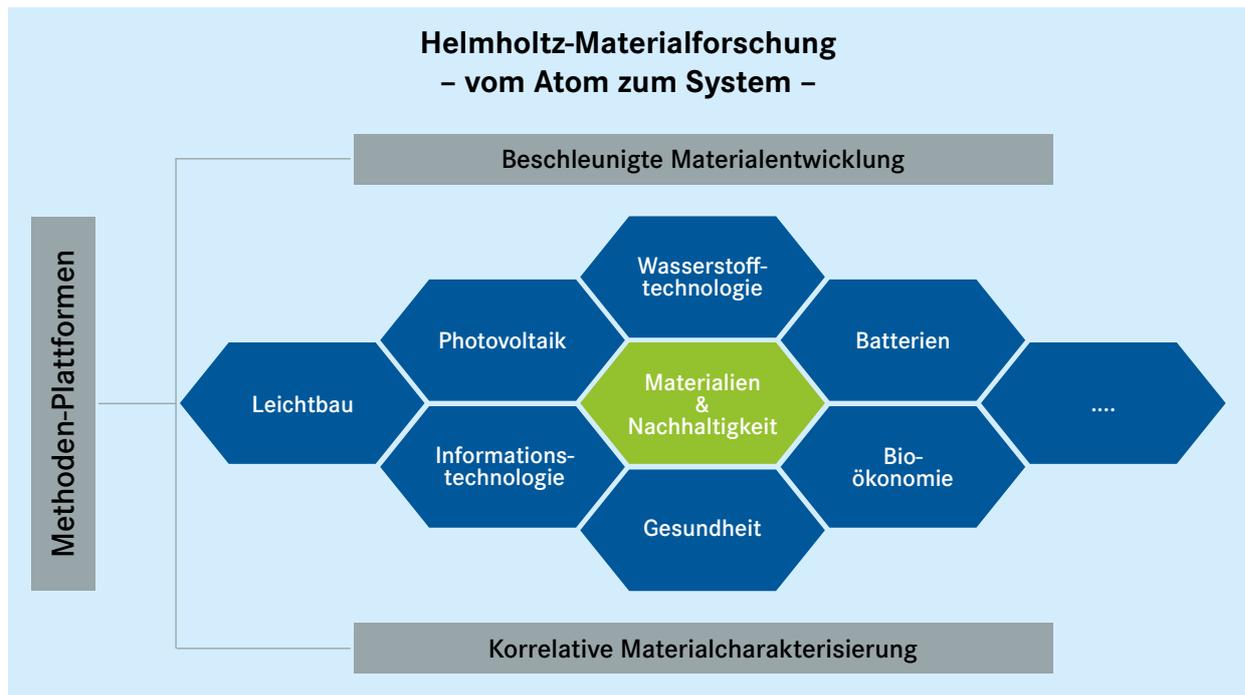


Abb. 2: Aktivitäten der Materialforschung in Helmholtz – weltweit sichtbare Themengebiete als gemeinsame Basis zu FB-übergreifenden Arbeiten. *Methoden-orientierte Plattformen* (grau) unterstützen *anwendungsorientierte Schwerpunkthemen* (dunkelblau). Von zentraler Bedeutung für alle ist die Thematik „*Materialien und Nachhaltigkeit*“ (grün).

Projekte im Rahmen des IVF (z.B. Pilotprojekte innerhalb der Plattformen des Helmholtz-Inkubators Information & Data Science, die eine Brücke der Daten- zur Materialwissenschaft schlagen und eng mit den Aktivitäten in der NFDI verzahnt werden sollen), sowie die Innovationspool-Vorhaben der beteiligten FB, deren Themen Verbindungen zu den Forschungsbereichen Energie, Materie, LRV und Gesundheit ermöglichen. Die genannten Vorhaben werden daher auch bei der Implementierung der Materialforschungsstrategie eine wichtige Rolle als Kristallisationspunkte der Methoden-Plattformen spielen und die Aktivitäten der Schwerpunkthemen auf vielfältige Weise beeinflussen. Zur Strukturierung des Materialforschungsnetzwerks werden vor allem in den Schwerpunkthemen verschiedene Instrumente, wie z.B. „*topical meetings*“, für den Wissenstransfer untereinander und auch für Interessenten aus der Industrie und die Anbahnung koordinierter Drittmittelprojekte aufgebaut werden. Die Ausbildung von Nachwuchswissenschaftlerinnen und -wissenschaftlern über Schwerpunkthemen hinweg ist ein weiteres Anliegen, das durch die Aktivitäten innerhalb des Netzwerks angegangen werden soll.

Langfristig werden diese strukturbildenden Maßnahmen die Materialforschung in der Helmholtz-Gemeinschaft stärker vernetzen, so dass strategische Ent-

scheidungen gemeinsam getroffen werden können. Eine gelungene nationale und internationale Vernetzung sowie erfolgreicher Technologietransfer bedeuten einen unmittelbaren Wettbewerbsvorteil, wozu die Helmholtz-Materialforschungsstrategie einen entsprechenden Beitrag leistet. Hierzu gehören insbesondere

- eine vernetzte Zusammenarbeit von Programmen und Forschungsbereichen in der Helmholtz-Gemeinschaft zu ausgewählten Themengebieten,
- der Ausbau des Netzwerks hin zu den Universitäten, um die Aus- und Weiterbildung bereits im Studium gezielt beginnen zu können,
- Investitionen in einzigartige Forschungsinfrastrukturen, sowie
- eine Transferstrategie, die gezielt Ausgründungen fördert und den Weg zum Produkt ermöglicht.

INNOVATION UND TRANSFER

In den Fokus der industriellen Innovation rücken nachhaltige Materialien, die Ihren Einsatz in zukunftsrelevanten Themenfeldern wie z.B. der Energiewende haben. Somit behält die Materialforschung für die Gesellschaft und den Wirtschaftsstandort Deutschland ihre große Bedeutung und trägt zur technologischen Souveränität¹ Deutschlands und Europas bei. Vor allem die beschleunigte und optimierte Materialentwicklung,

¹ Unter technologischer Souveränität (TS) versteht das BMBF den Anspruch und die Fähigkeit zur kooperativen (Mit-)Gestaltung von Schlüsseltechnologien und technologiebasierten Innovationen. Diese umfasst die Formulierung von Anforderungen an Technologien, Produkte und Dienstleistungen entsprechend der eigenen Werte und die Mitbestimmung entsprechender Standards auf den globalen Märkten. Internationale Zusammenarbeit nimmt dabei eine wichtige Rolle ein. TS kann jedoch erfordern, in bestimmten Schlüsselbereichen (europäisch) autark agieren zu können, wenn dies zum Erhalt der staatlich-regulatorischen Souveränität oder zur Vermeidung einseitiger Abhängigkeiten notwendig ist. Dies stellt die offenen weltweiten Wirtschafts- und Wissenschaftsbeziehungen Deutschlands nicht in Frage. Arbeitsteilung, Vernetzung und multilaterale Kooperation sind weiterhin zentrale Bausteine für die Fähigkeit Deutschlands und Europas, globale Entwicklungen nicht nur zu erdulden, sondern nach eigenen Vorstellungen und Interessen mitzugestalten.

die im Zusammenhang mit der *Digitalisierung* möglich wird, bietet entsprechende Lösungen, insbesondere wenn schon in der Entwicklungsphase der erforderliche Ressourceneinsatz und die Produktionstechnik berücksichtigt werden.. Die Helmholtz-Gesellschaft trägt durch die Kompetenzen Ihrer Zentren und die dort verankerten Forschungsinfrastrukturen dazu bei, der Industrie entsprechende Ansätze zu liefern. Durch die hier vorgestellte Materialforschungsstrategie bündelt Helmholtz die Aktivitäten vor allem in den Schwerpunktthemen und erhält damit einen unschätzbaren Innovationsgewinn.

Ein zunehmend wichtiger Treiber in Wirtschaft und Gesellschaft ist die *Nachhaltigkeit* (siehe auch Kapitel V). Dabei garantiert die tiefe und vielfältige Verankerung der Materialforschung als Querschnittsthema in den Forschungsbereichen eine schnelle Umsetzung von materialwissenschaftlichen Innovationen in Lösungen von hoher gesellschaftlicher Relevanz. Gleichzeitig triggern Anwendungsfragen mit hoher Komplexität immer wieder materialwissenschaftliche Entwicklungen. Hierbei stellt sich die Helmholtz-Gemeinschaft in besonderer Art und Weise der zunehmenden Forderung nach *Nachhaltigkeit* in Wirtschaft, Umwelt und Gesellschaft.

Um ein international führender Spitzenstandort für hochinnovative Industrieprodukte zu bleiben, ist es essenziell, dass künftig der Bedarf an immer komplexeren Materialien sowie an deren spezifischen Verarbeitungs- und Recyclingtechnologien zuverlässig und auf nationaler Ebene bedient werden kann. In vielen für Deutschland besonders relevanten Industriezweigen machen die Materialkosten aufgrund weitgehender Automatisierung der Produktion inzwischen den dominierenden Kostenfaktor aus (Automobile: 50%, Batterien: 80%). Um hier wettbewerbsfähig zu bleiben,

müssen Konzepte zur Parallelisierung, Automatisierung und *Digitalisierung* sämtlicher Elemente der Material- und Prozessentwicklungsketten vorangetrieben werden. Die Herausforderung in der Industrie sind vor allem von zwei Aspekten geprägt: Erstens, die Innovationskraft eines Unternehmens wird zukünftig in vielen Branchen davon abhängen, dass man Produkte ausgehend von der Nanostruktur der Materialien und der damit verbundenen Funktion entwickelt, sozusagen vom „Atom zum Bauteil“. Zweitens gilt es in diesem Kontext die Wertschöpfungsketten zu schließen, was insbesondere durch die Möglichkeiten der additiven Fertigung und der Flexibilisierung der Produktionsprozesse völlig neue Dimensionen in der individuellen Gestaltung von Materialsystemen eröffnet. Dadurch können in Deutschland Unternehmen, die frühzeitig diese Querschnittstechnologie einbeziehen, einen eindeutigen Wettbewerbsvorteil gegenüber der auf Massenproduktion ausgelegten Industrie in Asien aufbauen. Dieses stellt aber große Herausforderungen an die Entwicklungs- und Produktionsprozesse und bedarf eines echten Technologiewandels, zu dem Helmholtz beitragen kann.

Es wird Aufgabe von Helmholtz sein, die Schwerpunktthemen und Methoden-Plattformen (ähnlich mit den im BMBF Impulspapier genannten „Werkstoffplattformen“ und „Material Hubs“) aufzubauen bzw. die bereits vorhandenen Tätigkeiten zu vernetzen, um einen erfolgreichen Transfer von der Grundlagenforschung zum Produkt gestalten zu können. Die analytischen Instrumente der Helmholtz-Gemeinschaft bilden dabei einen Mehrwert, der durch kein Unternehmen und auch nicht durch andere Organisationen aufgebracht werden kann. Es wird insgesamt darauf ankommen, dass für den Transfer entscheidende Entwicklungen Zentren- und FB-übergreifend aufgegriffen und auf



IV. IMPLEMENTIERUNG DER HELMHOLTZ-MATERIALFORSCHUNGSSTRATEGIE

industrielle Bedarfe zugeschnitten werden. Hierbei ist die Verbindung zu den anderen drei Außeruniversitären Forschungseinrichtungen (Fraunhofer, Leibniz, Max-Planck) ein wichtiger Baustein, um industrielle Fragestellungen mit der breiten Kompetenz des deutschen Forschungssystems beantworten zu können. Des Weiteren werden relevante Industriepartner eingeladen werden, um die Verknüpfung von Forschung und industrieller Bedarfe zielführend voranzutreiben.

Wissens- und Technologietransfer wird als Teil der Helmholtz-Mission bereits erfolgreich gelebt. Mithilfe von Beratungs- und Informationsdiensten, Weiterbildungsangeboten, Internet-Portalen, Bürgerdialogen, Reallaboren und anderen Formaten wird Wissen verständlich aufbereitet und für einen intensiven Austausch mit den jeweiligen Zielgruppen Politik, Verwaltung, Wirtschaft, Zivilgesellschaft, Bildung und Medien zur Verfügung gestellt. Auch die Helmholtz-Schülerlabore und die sogenannten Bürgerwissenschaften (Citizen Science) werden hierfür verwendet. Die Materialforschung soll sich ebenfalls solcher Formate bedienen und damit einer breiten Öffentlichkeit zugänglich werden.

Interne Förderprogramme sowie **Innovations- und Transfermanager** an den Helmholtz-Zentren ermöglichen es Forschungsergebnisse, Daten und Technologien gezielt in die Anwendung zu bringen. Der Erfolg zeigt sich an zahlreichen Patenten, Ausgründungen und Spinoffs, die auch langfristige wirtschaftliche Perspektiven aufbauen konnten.

TALENTFÖRDERUNG

Talentförderung ist eine weitere entscheidende Säule der Materialforschungsstrategie und findet Anwendung auf allen Ebenen der frühen aber auch weiterführenden akademischen Karriere der Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler. Bereits jetzt bietet Helmholtz durch die Zusammenarbeit mit Universitäten in mehr als 15 Graduiertenkollegs und -schulen eine hohe Qualität zur fachspezifischen, aber auch interdisziplinären Ausbildung in der Materialwissenschaft und Werkstofftechnik. Zur Förderung von Promovierenden leisten dabei die beteiligten Zentren einen entscheidenden Beitrag. Die Vernetzung dieser Schulen durch gemeinsame Aktivitäten bzw. Austauschformate soll die Schlagkraft in der Ausbildung junger Talente noch erhöhen. Dies wird im Rahmen des Inkubators „*Information & Data Science*“ des Impuls- und Vernetzungsfonds auf dem Gebiet der Informationstechnologie von der Helmholtz-Gemeinschaft bereits erweitert. Insgesamt werden also die Materialforschungsaktivitäten zwischen den

Programmen der Helmholtz-Gemeinschaft durch eine optimierte Vernetzung auf der Ebene der Promovierenden noch verbessert werden und damit auch die Weiterqualifikationsmöglichkeiten, sowie Karrieren in der Wissenschaft gefördert werden. Dazu sollen geeignete Formate entwickelt werden, wie z.B. Trainingsnetzwerke und Summer/Winter Schools, die insbesondere die übergreifenden Themen der Methodenplattformen allen Promovierenden der Gemeinschaft näherbringt.

Beispielsweise wird für Promovierende und Postdocs derzeit ein zentrenübergreifendes „*Training Network Computational Materials Design: Fortgeschrittene Werkzeuge und Techniken*“ im Forschungsbereich Information, Programm „*Materials System Engineering*“ geplant. Darüber hinaus werden individuelle Mittel für Veröffentlichungen, die Teilnahme an Konferenzen, eingeladenen Vorträgen und Fortbildungen bereitgestellt, um junge Forschende dabei zu unterstützen, wissenschaftlich unabhängig zu werden. Weiterhin werden Studierende im Masterstudium, Promovierende und Postdocs ermutigt, an spezifischen Mentoring-Programmen in der Materialforschung und verschiedenen Personalentwicklungskonzepten der Zentren teilzunehmen.

Im Rahmen der Materialforschungsstrategie soll des Weiteren die Netzwerkbildung auf der Karrierestufe der Juniorprofessorinnen und -professoren bzw. Nachwuchsgruppenleiterinnen und -leiter gefördert werden. Dieses wird durch die beteiligten Zentren auch finanziell unterstützt, aber von den Mitgliedern getragene Netzwerk sollen gemeinsame Aktivitäten wie wissenschaftliche Vortragsveranstaltungen mit international ausgewiesenen Material-





wissenschaftlerinnen und -wissenschaftler, persönliche Weiterqualifikationsmaßnahmen, Ideen-Workshops für neue Forschungsaktivitäten und mehr, organisieren.

FÖRDERINSTRUMENTE

Es ist offensichtlich, dass die Themen der Materialforschung der Helmholtz-Gemeinschaft nicht nur durch die Programme gefördert werden, sondern auch durch vielfältige Drittmittelprojekte. Herausragende Beispiele sind die Beteiligungen an den Exzellenz-Clustern „3D Matter Made to Order“ (3DMMO) zur Entwicklung von neuartigen Druckverfahren zur Herstellung von Nanomaterialien, „Post Lithium Storage Batterieforschung“ (POLiS) zur Entwicklung von Materialien für nachhaltige Batterien und „Complexity and Topology in Quantum Matter“ (ct.qmat) wie auch „Matter and Light for Quantum Computing“ (ML4Q) zur Erforschung komplexer und topologischer Quantenmaterialien und deren Nutzung in technischen Anwendungen. Dementsprechend sollte eine strategische Förderung der Materialforschung in der Helmholtz-Gemeinschaft nicht auf einzelne Themen abzielen, sondern im Querschnitt die Methodenkompetenz fördern und damit auch weiterhin die Grundlage zu schaffen, herausragende Ergebnisse in den Anwendungsfeldern erzielen zu können.

In vielen Anwendungsfeldern ist die Entwicklung von Hochdurchsatzmethoden und die Automatisierung von Prozessen der Schlüssel für eine enorme Beschleunigung der Produktentwicklung und signifikante Kosteneinsparungen in der Produktion. Herausragende Beispiele sind die Automobil-, Flugzeug- und Elektronik-Industrie, deren Produkte ohne Einsatz von Automatisierungsstrategien heutzutage entweder überhaupt nicht oder nicht kostengünstig hergestellt werden können. Dieser Trend wird zunehmend auch auf Forschungsinfrastrukturen übertragen, befindet sich in der Materialforschung aber noch im Anfangsstadium (z.B.

Material-Beschleunigungsplattform des EU-Battery2030+-FET Proactive). Die Helmholtz-Gemeinschaft wird das sich aus der Parallelisierung, Automatisierung und *Digitalisierung* aller Elemente der Material- und Prozessentwicklung ergebende Potenzial in ihrer Materialforschungsstrategie auch unter Einbindung korrelativer Charakterisierungsverfahren durch die hier vorgestellten Plattformen (Kapitel V) mit großem Engagement verfolgen und auch den Transfer dieser Methodik in die Industrie, z.B. in einer möglichen Wegbereiter-Kampagne der Helmholtz-Gemeinschaft, vorantreiben. Durch die Partnerschaft der an der Materialforschung beteiligten FB werden durch die Umsetzung dieser Forschungsrichtung völlig neue Möglichkeiten der Materialmodellierung, -synthese und -charakterisierung an vorhandenen Forschungsinfrastrukturen geschaffen und innovative Mechanismen für deren Transfer in die industrielle Materialentwicklung etabliert.

Mit der Förderung aus dem Impuls- und Vernetzungsfonds der Helmholtz-Gemeinschaft über eine Wegbereiter-Kampagne würde neben der mittel- und langfristigen Erreichung der Ziele vor allem das vorhandene Potential an Nachwuchswissenschaftlerinnen und -wissenschaftler verbessert genutzt werden. Hierbei kann zunächst auf bereits etablierte Instrumente und Methoden als Beispiel zurückgegriffen werden, wie aktuelle Förderaktivitäten des BMBF (wie z.B. NanoMatFutur und MaterialDigital). Zukünftig sollten im Hinblick auf das Impulspapier des BMBF zur Materialforschung die neu etablierten Fördermöglichkeiten der „Material Hubs“ für die Schwerpunktthemen der Helmholtz-Materialforschungsstrategie in Einklang gebracht werden. Die Verbundprojekte einer solchen Wegbereiter-Kampagne der Helmholtz-Gemeinschaft werden insbesondere Kooperationen fördern, die die Erreichung der Paktziele zu Nachwuchs und Technologietransfer unterstützen.

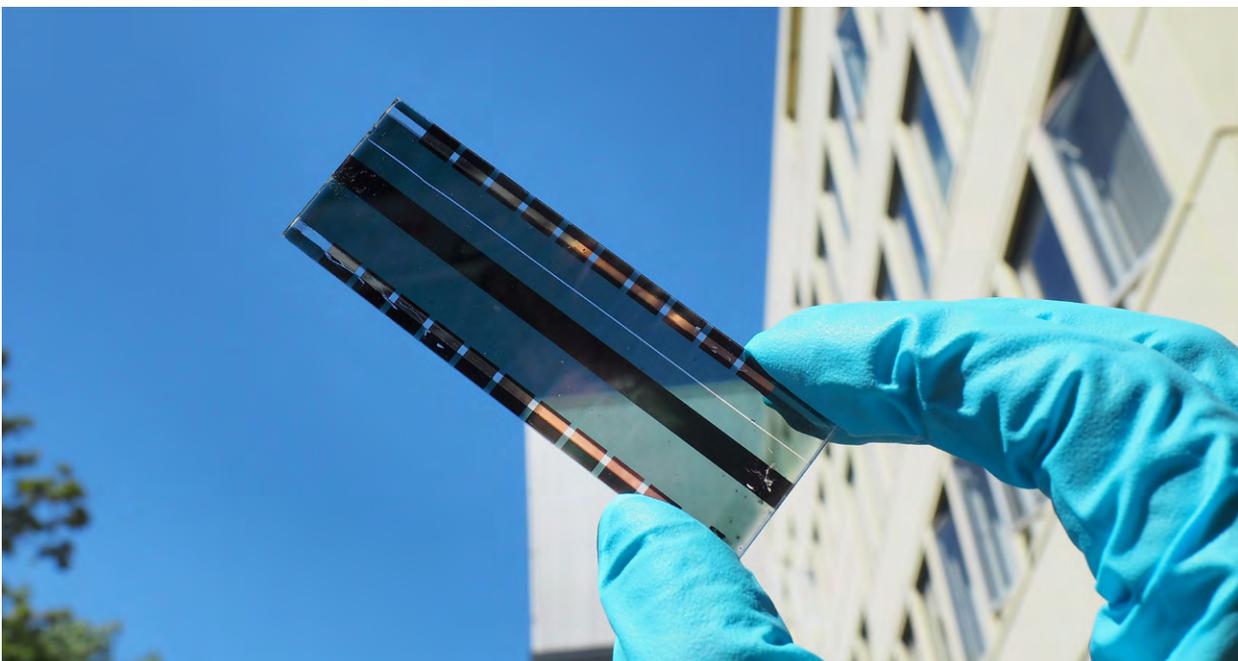
V. SCHWERPUNKTTHEMEN & PLATTFORMEN DER HELMHOLTZ-MATERIALFORSCHUNG



Zur optimalen Ausnutzung der vorhandenen Ressourcen soll das Netzwerk auf den hier ausgewählten strategisch relevanten und weltweit sichtbaren Themengebieten, den sogenannten Schwerpunktthemen, aufgebaut und dieses kontinuierlich angepasst werden (siehe Abbildung 2). Damit wird auf Fragestellungen fokussiert, die mittels Entwicklung und Einsatz neuer Materialien und der dazu notwendigen Methoden den Herausforderungen der Gesellschaft und Wirtschaft Rechnung tragen.

Das Zusammenwirken der Zentren über die Grenzen der Forschungsbereiche hinweg unter Einbindung der vorhandenen und geplanten Infrastrukturen wird einen essentiellen Beitrag zur Bearbeitung der Schwerpunktthemen leisten. Die Materialforschungsstrategie soll die Innovationsfähigkeit der Helmholtz-Gemeinschaft stärken ohne zu vernachlässigen, dass hierfür eine breite Kompetenzbasis in den verschiedenen Forschungsbereichen notwendig ist.

Hierfür bringen die daran beteiligten Zentren z. T. eigene thematische Schwerpunkte mit ihren entsprechenden Kompetenzen ein. Für die in PoF IV geplanten Tätigkeiten werden zusammenhängende Aktivitäten der unterschiedlichen FB, die im jeweiligen Programm bereits in Topics (wie z.B. die Photovoltaik im FB Energie, Programm MTET) dargestellt werden, gebündelt und können so zur Weiterentwicklung der FB-übergreifenden Materialforschung beitragen. Bei allen Aktivitäten werden die *Nachhaltigkeit* und die Kreislaufwirtschaft der Materialien als zentraler Aspekt ebenfalls betrachtet. Aus diesem Grund wird diesem übergeordneten Querschnittsthema im Folgenden ein eigener Abschnitt gewidmet.



QUERSCHNITTSTHEMA „MATERIALIEN UND NACHHALTIGKEIT“

KURZBESCHREIBUNG

Materialien stehen in vielerlei Bezug zur *Nachhaltigkeit*: einerseits müssen Materialien nachhaltig produziert und in eine effiziente Kreislaufwirtschaft eingebunden werden. Andererseits tragen neue Materialien in der Anwendung, wie an vielen Beispielen in den folgenden Schwerpunktthemen gezeigt werden wird, zum Ziel der *Nachhaltigkeit* bei. Dabei sind (a) nachhaltige Produktions- und Rohstoffgrundlagen anzustreben und (b) Veränderungen des Konsumverhaltens und der Lebensdauer der Produkte und von der Materialentwicklung zu unterstützen. Ein dritter Anwendungsbereich sind (c) Materialien in Anwendungen zum Schutz der Umwelt oder zur Reinigung von Umweltkompartimenten.

Die Menge und die Vielfalt der Nutzung von Rohstoffen für Materialien steigt stetig an – insbesondere zum Aufbau erneuerbarer Energiesysteme, für die Energieeffizienz oder die Elektromobilität, aber ebenso für die nachhaltige Produktion von Chemikalien, und für die digitale Kommunikation werden immer mehr und neue Materialien benötigt. Deshalb ist der nachhaltige Einsatz von Ressourcen ein Schlüsselement für verantwortungsvollen Konsum und Produktion, wie dies die Vereinten Nationen in den „Sustainable Development Goals“ (SDGs) gefordert haben. Davon betroffen sind vielfältige Ressourcen für Materialien, von mineralischen und

metallischen (anorganischen) bis hin zu biologischen Ressourcen und Kohlenstoff aus anthropogenen Quellen. Gleichzeitig steigen die Herausforderungen bei der umwelt- und sozialverträglichen Bereitstellung von Rohstoffen: viele für den Abbau geeignete, geogene Lagerstätten und andere primäre Rohstoffquellen befinden sich in empfindlichen Ökosystemen, in unwirtlichen Gebieten oder auch in großen Tiefen der Erdkruste oder im Ozean. Der Trend zu steigender Komplexität und Variabilität von Bauelementen und Materialsystemen führt dazu, dass deren Nutzung als Sekundärrohstoffe immer schwieriger wird. Hier ist eine Trendumkehr notwendig: um die nachhaltige Versorgung langfristig zu sichern, müssen Rohstoffe im Wirtschaftskreislauf (Circular Economy) möglichst energie- und rohstoffeffizienter genutzt, Verluste minimiert und umweltfreundlich recycelt werden. Diese Ziele müssen bereits in der Designphase von neuen Materialien und Bauelementen Berücksichtigung finden. Dazu bedarf es der inter- und transdisziplinären Entwicklung innovativer Technologien und Lösungsansätze, digitaler Plattformen und datenskalierbarer Modelle für die Material-, Chemie- und Energie-Infrastruktur. Moderne Materialforschung zielt deshalb darauf ab, Rohstoff- und Energieeffizienz zu verbessern. Zunehmende Kreislaufwirtschaft wird es ermöglichen, die heute teilweise massiven sozialen Konsequenzen bei der Gewinnung von Primärrohstoffen zu reduzieren

AKTUELLE AKTIVITÄTEN UND MITTELFRISTIGE ZIELE IN DER POF IV

Verbesserung der Ressourcensituation

- Entwicklung innovativer und nachhaltiger Technologiekonzepte zur ressourcen- und energieeffizienten Aufbereitung komplexer Ressourcen.
- Erprobung von neuartigen Technologien zur chemischen Verarbeitung komplexer Ressourcen.
- Erarbeitung neuer Strategien und Methoden für die **multidimensionale und multiskalige Rohstoffcharakterisierung** durch eine vielfältige Methodenplattform.
- Integration von Prozess- und Rohstoffwissen zur quantitativen Vorhersage der Ressourcen- und Energieeffizienz.

Kreislaufwirtschaft und nachhaltige Nutzung

- Entwicklung einer Plattform zur quantitativen Bewertung von Teilen der Kreislaufwirtschaft.
- Digital unterstütztes Design **hochspezifischer Trennverfahren** (Membranendesign).

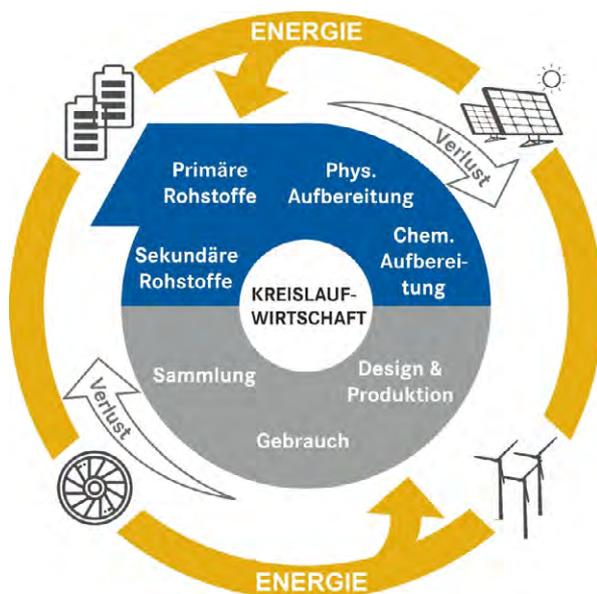


Abb. 3: Die angestrebte Kreislaufwirtschaft ist eng mit dem Energiesystem verbunden. Beide interagieren miteinander und begrenzen sich gegenseitig (Quelle: HZDR).

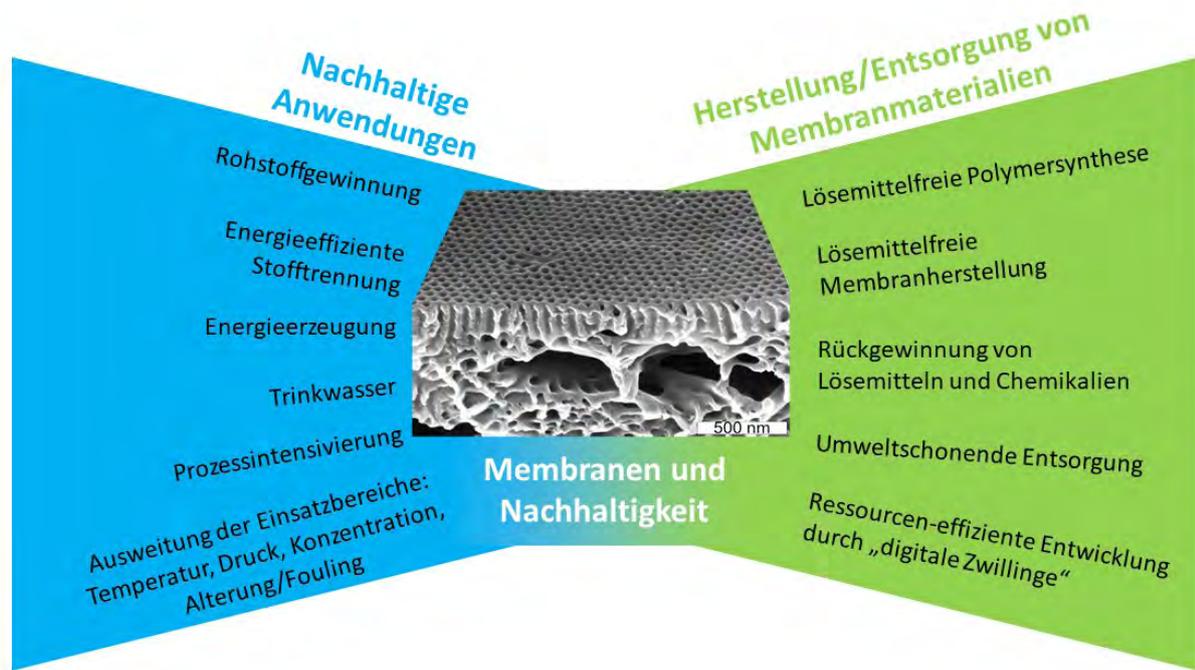


Abb. 4: Exemplarische Darstellung zu Materialien und Nachhaltigkeit am Beispiel von Membranen. Membranen werden in vielfältigen Anwendungen eingesetzt, die für nachhaltiges Wirtschaften, Klima- und Umweltschutz notwendig sind. Gleichzeitig ist das Ziel im gesamte Life Cycle von Membranen von der Produktion bis zur Wiederverwertung nachhaltige Produktion und Verwendung einzusetzen (Quelle: HZG).

- **Additive Fertigung:** Erweiterung der Materialpalette in Richtung Keramik, Metall, und Kompositen zur ressourcenschonenden Fertigung.
- **Prozessmodellierung** zur Reduzierung des Materialverbrauchs bei Additiven Fertigungsverfahren.
- Verlängerung der **Lebensdauer metallischer Strukturen** durch Entwicklung von neuen Konzepten zum umweltfreundlichen Korrosionsschutz.
- Entwicklung von (z.B. membranbasierten) **Trennverfahren zur umweltschonenden Gewinnung** von Rohstoffen.
- Umweltschonende Erschließung Rohstoffquellen z.B. aus großen Tiefen im Meer oder aus komplexen geogenen Vorkommen.

Kreislaufwirtschaft und nachhaltige Nutzung

Reduzierung der Umweltbelastung

- Membranen und Membranverfahren sowie die dazu gehörigen Simulationstools für die Schließung von Stoffkreisläufen, z.B. für die Abtrennung von CO₂ oder Zero-Discharge Ansätze bei der Verwendung von Wasserressourcen.

LANGFRISTIGE STRATEGISCHE ZIELE

Die hier genannten Ziele sind im Hinblick auf die Materialentwicklung relevant, können aber nur zusammen mit weiteren Partnern aus Forschung und Industrie angegangen werden.

Verbesserung der Ressourcensituation

- Entwicklung und Einsatz digitaler Werkzeuge spezifisch mit dem Ziel, **Ressourcen zu sparen und umweltfreundliche Entwicklung und Herstellung von Materialien** zu ermöglichen.
- Erweiterung und Verbesserung von Verfahren für **energieeffiziente Stofftrennungen** in industriellen Prozessen.

- Schließung relevanter Materialkreisläufe durch **innovative energie- und ressourcenschonende Technologien** (z.B. für Konstruktionswerkstoffe und Funktionsmaterialien).
- Etablierung von Design-Prinzipien, die den Kreislauf- und Recycling-Aspekt ins Material-, Bauteil- und Produktdesign integrieren.
- Entwicklung von nachhaltig einsetzbaren Materialkombinationen, z.B. von Polymeren und anorganischen Materialien, als Stützstrukturen, transportaktive Matrixmaterialien oder Katalysatoren.
- Erweiterung der Einsatzbereiche von effizienten Materialien hinsichtlich Temperatur-, Druck- und Zusammensetzung sowie Chemikalienbeständigkeit und Alterung.
- Konsequenter Einsatz material- und umweltschonender additiver Fertigungsverfahren.
- **Lebenszyklusverlängerung von Materialstrukturen durch Umsetzung von aktiven Schutzkonzepten** und vorbeugenden Instandhaltungsansätzen.

- Entwicklung und Einsatz von geeigneten Werkzeugen zur quantitativen Bewertung der Effizienz und *Nachhaltigkeit* des Recyclings und der Kreislaufwirtschaft in transdisziplinären Verbänden mit Umweltforschern und Ökonomen.

Reduzierung der Umweltbelastung

- Entwicklung nachhaltiger und skalierbarer Konzepte zur Schließung des anthropogenen Kohlenstoffkreislaufs durch biologisches und chemisches Recycling.
- Entwicklung von Materialsystemen und Trennverfahren zur Abtrennung von Schadstoffen aus verschiedenen Umweltkompartimenten (Wasser, Boden, Atmosphäre).

WESENTLICHE ZUKÜNFTIGE AKTIVITÄTEN

Verbesserung der Ressourcensituation

- Integration der Daten aus der **multidimensionalen Rohstoffanalytik** mit Ansätzen des maschinellen Lernens. Dieses verbesserte Stoffverständnis soll in Echtzeit erreicht werden, um Materialströme besser charakterisieren – und effizienter verarbeiten zu können.
- Erstellung **neuartiger, sogenannter geometallurgischer Modelle für geogene Rohstoffkörper** (Lagerstätten) durch die Integration von Prozess- mit Rohstoffdaten. Ähnliche Modelle sollen auch für sekundäre Ressourcen entwickelt werden.
- Geschlossene Abbildung der **Herstellung von Polymermembranen durch Modelle** und deren Einsatz für die Simulation und Optimierung der Verfahren („*Digitaler Zwilling*“).

Kreislaufwirtschaft und nachhaltige Nutzung

- Entwicklung eines quantitativen Labels für Verbrauchsgüter für die Gesellschaft für Ressourcen- und Energieeffizienz.
- Entwicklung neuartiger Membranmaterialien und -prozesse auf Basis von mathematischen Modellvorhersagen sowie eine verstärkte Integration in Prozessintensivierung.
- Herstellung von Gasseparationsmembranen durch lösemittelfreie Prozesse.
- Reduzierung der Umweltbelastung.
- Entwicklung von **KI-Ansätzen zur Vorhersage der Lebensdauer von Materialien bzw. Bauteilen unter komplexen Umweltbedingungen** und Etablierung intelligenter prädiktiver Instandhaltungskonzepte mit dem Ziel einer verlängerten Lebensdauer.
- Entwicklung von Materialien für „*negative CO₂-Emissionen*“ zur Reduzierung der CO₂-Belastung der Atmosphäre.

NACHHALTIGKEIT ALS QUERSCHNITTAUFGABE FÜR SCHWERPUNKTTHEMEN UND METHODEN-PLATTFORMEN

Die *Nachhaltigkeit* des Rohstoff- und Materialeinsatzes ist ein wichtiger und übergreifender Aspekt, welcher bei jedweder Entwicklung innovativer Materialien bzw. Produkte in allen Schwerpunktt Themen und bei den Methodenplattformen Berücksichtigung finden muss. Dabei sollte bei der Materialauswahl und -entwicklung (z.B. für Informations- und Wasserstofftechnologien oder die Herstellung von Photovoltaikmodulen oder Batterien, etc.) schon frühzeitig die Verfügbarkeit und nachhaltige Nutz- und Rezyklierbarkeit der eingesetzten Rohstoffe analysiert und die damit verbundenen ökologischen und sozialen Folgen über den gesamten Lebensweg abschätzt werden. Bei der anschließenden Produktentwicklung sollten nicht nur die Materialeinsparung (z.B. durch Leichtbau) eine zentrale Zielgröße sein, sondern auch andere Nachhaltigkeitsaspekte wie Langlebigkeit, Reparaturfreundlichkeit und Recyclingfähigkeit berücksichtigt werden. Die Entstehung von Reststoffen sollte dabei minimiert – und Wertstoffe in möglichst geschlossenen Kreisläufen geführt werden. Dazu wird es notwendig sein, Ansätze und Werkzeuge zu entwickeln, die möglichst frühzeitig während der Material-/Produktentwicklung einen qualitativen und quantitativen Blick sowohl auf die Chancen in Gestalt der zu erzielenden Potentiale als auch die Herausforderungen, wie Tradeoffs und unvermeidbare Verluste, im Rahmen der Kreislaufwirtschaft ermöglichen, um die Ziele des Querschnittsthemas „*Materialien und Nachhaltigkeit*“ zu erfüllen.

SCHWERPUNKTTHEMA "MATERIALIEN FÜR DIE INFORMATIONSTECHNOLOGIE"

KURZBESCHREIBUNG

Die Materialforschung war immer schon ein Treiber für die Informationstechnologie: Materialien mit neuen und besseren Eigenschaften haben neue und bessere Möglichkeiten in der Verarbeitung, Speicherung und Übertragung von Daten gebracht.

Während bis Ende der 1990er Jahre in der Mikroelektronik fast ausschließlich der Halbleiter Silizium (und in der Optoelektronik Verbindungshalbleiter) eingesetzt wurde, hat sich das Spektrum der Materialien seither stetig erweitert, z.B. durch *high k*-Dielektrika oder Germanium. Dies war notwendig, um die Miniaturisierung und die damit einhergehende Leistungssteigerung entsprechend dem *Moore'schen Gesetz* weiterhin vorantreiben zu können. Auch heute wird weiter Forschung in dieser Richtung betrieben, als Beispiel sei die Halbleiterlegierung GeSn genannt. Jedoch läuft das *Moore'sche Gesetz* in eine Sättigung und es wird daher an einer Vielzahl alternativer Möglichkeiten zur Informationsverarbeitung geforscht, die andere Konzepte und damit auch andere Materialklassen benötigen. Eine zentrale Position nehmen hier die Quantenmaterialien mit neuartigen topologischen, elektronischen und Transporteigenschaften ein. Zwei wichtige neue Konzepte bestehen in der Erweiterung der Computing-Paradigmen durch neuromorphes Computing und Quantencomputing.

Basismaterialien für neuromorphes Computing sind verschiedenste Oxide, die als memristive Bauelemente, aber auch einfach als resistive Speicher eingesetzt werden können. Neben den redox-basierten Oxiden spielen aber auch Phasenwechselmaterialien wie GeSbTe und zunehmend auch magnetische Vielschichtsysteme wie z.B. Co/Pt hier eine wichtige Rolle.

Zum Quantencomputing gibt es mehrere verschiedene festkörperbasierte Ansätze. Zum einen werden bestimmte Defektzustände in Halbleitern wie SiC als Qubits verwendet. Hier liegt eine Herausforderung in der kontrollierten Herstellung dieser Defekte. Zum anderen, in noch weiter in die Zukunft weisenden Konzept sollen topologisch geschützte Anregungen wie Majorana-Fermionen, z.B. bestehend aus Skyrmionen oder Nanodrähten im Kontakt mit Supraleitern, als Qubits eingesetzt werden. Die Basis dafür ist die Forschung an den oben genannten Quantenmaterialien: darunter fallen z.B. auch topologische Isolatoren oder Weyl-Halbmateriale, aber auch Halbleiter-Nanodrähte und Quantenpunkte.

Zum gesamten Komplex der Quantentechnologie existiert bereits ein unabhängiges Helmholtz-Strategiepapier, mit dem die Aktivitäten abgestimmt sind.

Eine materialwissenschaftliche Revolution hat sich mit der Entdeckung von Graphen und anderen sogenannten 2D-Materialien (u.a. Übergangsmetall-Dichalkogenide wie MoS₂) ereignet. Diese Materialien bestehen aus atomaren Einzelschichten, die auch zu Heterostrukturen mit neuen, maßgeschneiderten Eigenschaften gestapelt werden können (Abb. 5). Dieser „2D-Baukasten“ bietet vielfältige Möglichkeiten zur Nutzung und Manipulation der elektronischen und Spinzustände, aber auch zur Kontrolle von Redoxprozessen. Dieses enorme Potential erinnert an die Revolution in der Halbleiterphysik durch die Erfindung der Molekularstrahlepitaxie und damit der Halbleiterheterostrukturen in den 1970er und 1980er Jahren. Bei den 2D-Materialien besteht allerdings noch eine große Herausforderung darin, sie großflächig mit Standard-Dünnschichtmethoden abzuscheiden und geeignet zu dotieren.

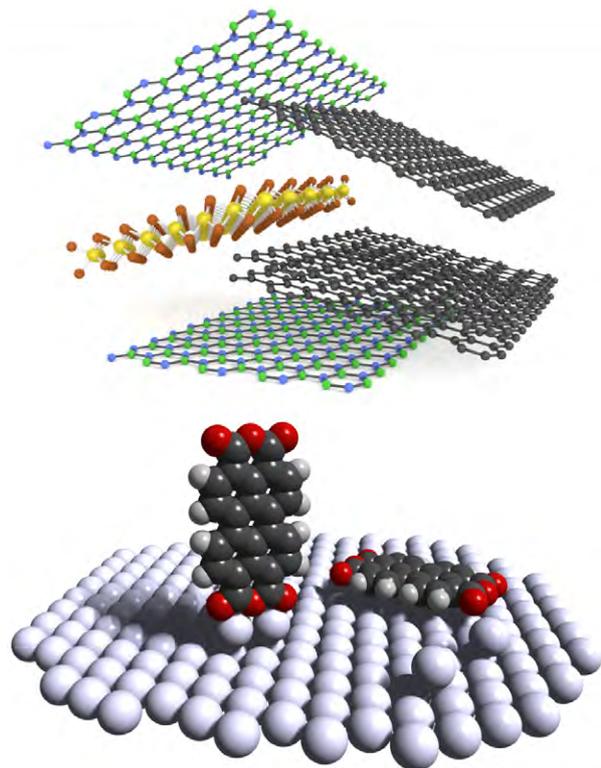


Abb. 5: Zwei Ansätze zur Herstellung von Nanostrukturen: Stapeln von Monolagen aus 2D-Materialien in beliebiger Reihenfolge (oben), und 3D-Nanostrukturen durch molekulare Manipulation (unten) (Quelle: FZJ).

Magnetische Materialien stellen einen besonderen Fokus der involvierten Helmholtz-Zentren dar. Während diese bisher vorwiegend als Sensoren und zur Datenspeicherung eingesetzt wurden, wird bereits seit langem auch an spintronischen Bauelementen geforscht, in denen der Elektronenspin anstatt der Ladung zur Informationsverarbeitung eingesetzt wird. Auch kollektive Anregungen wie Spinwellen (Magnonen) können eine Rolle in der *on chip*-Informationsübertragung spielen. Spezielle topologische Spinkonfigurationen, wie die schon oben erwähnten Skyrmionen, könnten Datenspeicherung mit höherer Dichte und neuromorphe Funktionalitäten ermöglichen, bzw. auch eine Brücke zum Quantencomputing schlagen.

AKTUELLE AKTIVITÄTEN UND MITTELFRISTIGE ZIELE IN DER POF IV

Gemäß der relevanten Forschungsprogramme in den FB Information und Materie sollen die detaillierte Struktur und die elektronischen, optischen, magnetischen und chemischen Eigenschaften von Materialien sowie die elektronischen und chemischen Prozesse erforscht werden. Die wichtigsten Materialklassen wie Halbleiter, 2D-Materialien, Oxide, magnetische Materialien, Phasenwechselmaterialien und topologische Materialien werden dafür synthetisiert. Die Untersuchungen sollen mit höchster Zeit- und Ortsauflösung und unter gezielter Nutzung der Großgeräte und derer diagnostischen Möglichkeiten erfolgen (Programm MML – „*Von Materie zu Materialien und Leben*“ des Forschungsbereichs Materie), mit dem Ziel, möglichst **energieeffiziente Prozesse und auch neue Funktionalitäten für die Informationstechnologie zu identifizieren**. Insbesondere stehen hier die beiden Computing Paradigmen neuromorphes Computing und Quantencomputing im Fokus, die auch im Programm „*Natural, Artificial and Cognitive Information Processing*“ des Forschungsbereichs Information in der PoF IV abgebildet sind. Die neu gegründeten programmübergreifenden Joint Labs „*Virtual Materials Design*“ (JL VMD) und „*Integrated Model and Data Driven Material Characterization*“ (JL MDMC) komplementieren die Materialentwicklung durch simulations- und datengetriebene Methoden. Die Materialwissenschaft wirkt somit als Grundlage und Treiber, jedoch durch das virtuelle Materialdesign auch gleichzeitig als Anwendungsfelder der Informationstechnologie.

LANGFRISTIGE STRATEGISCHE ZIELE

Zentral ist die gezielte Identifikation des optimalen Materials mit der passenden Funktionalität für die jeweilige Anwendung, dessen Charakterisierung und Optimierung, um daraus optimale Bauelemente herstellen zu können.

- Aufbau einer Plattform zu Herstellung kontrollierter Schichtstrukturen von 2D-Materialien, sowie zur Herstellung von Quantensystemen auf **atom-by-atom-Basis**.
- Überwindung von Problemen mit der Stabilität unter Umgebungsbedingungen, genügend hoher Reinheit und **Reproduzierbarkeit von neuen Materialsyste-men**.
- Erstellung von multidimensionalen Phasen- und Eigenschaftsdiagrammen für ausgewählte Familien von Quantenmaterialien.
- Aufbau einer **Datenbasis für Protokolle zur Synthese von Quantenmaterialien** aus nanoskaligen Bausteinen auf der Basis umfangreicher automatisierter Experimentreihen.

WESENTLICHE ZUKÜNFTIGE AKTIVITÄTEN

Man kann erwarten, dass in der Zeit nach der PoF IV die neuen Computing-Paradigmen und damit auch die dafür relevanten Materialien eine noch größere Rolle spielen werden, und gleichzeitig die klassischen Halbleiter etwas an Bedeutung verlieren werden. Darüber hinaus ist es nicht unwahrscheinlich, dass bis dahin wieder eine neue Materialklasse entdeckt wird, die auch neue Perspektiven für die Informationsverarbeitung bieten wird; dies insbesondere auch, weil dann wohl viel systematischere und effektivere Methoden zur **Findung neuer Materialien mit bestimmten, erwünschten Eigenschaften** zur Verfügung stehen.

AUSGEWÄHLTE INFRASTRUKTURNUTZUNG

Größere Infrastrukturen werden bei Herstellung, Prozessierung und Charakterisierung von Materialien und deren Dynamik genutzt: Die wichtigsten sind die **Helmholtz Nanoelectronic Facility (HNF), das Ernst Ruska Centrum (ERC), das Ion Beam Center (IBC), der UNILAC Ionenbeschleuniger und CRYRING (GSI-FAIR), Hochfeldmagnetlabor Dresden (HLD), das Jülich Center of Neutron Science (JCNS), die Synchrotronstrahlungsquellen PETRA III, BESSY II, die FELs FLASH und European XFEL sowie die Strahlungsquelle ELBE**. Im internationalen Raum werden zusätzlich weitere Lichtquellen (**ELETTRA, SOLEIL, ALS, etc.**) genutzt.

SYNERGIEN

Synergien entstehen durch die Zusammenarbeit verschiedener Helmholtz-Zentren innerhalb der PoF auch FB-übergreifend, aber auch innerhalb von **BMBF- oder EU-Projekten**. Neben thematischer Zusammenarbeit spielen auch die gemeinsame Methodenentwicklung sowie die wechselseitige Nutzung der Großgeräte eine Rolle.

WISSENSTRANSFER MIT METHODEN-PLATTFORMEN

Die Methoden-Plattform „*Beschleunigte Materialentwicklung*“ unterstützt das Schwerpunktthema durch Design von Materialien mittels eines skalenübergreifenden Ansatzes (z.B. von DFT bis FEM) mit für die Anwendung optimalen Parametern (z.B. optimalen elektrischen, magnetischen, optischen Eigenschaften), die mittels automatisierten Workflows erzeugt werden können.

Die Methoden-Plattform „*korrelative Materialcharakterisierung*“ wird den Aufbau einer umfassenden Materialdatenbank zu strukturellen, elektrischen, magnetischen, und optischen Eigenschaften ermöglichen, und trägt zu deren experimentelle Untersuchungen entscheidend bei.

Ziel: Entwicklung und Untersuchung neuartiger Materialien für die beyond-Moore Ära der Informationsverarbeitung.

Beteiligte FB: Information, Materie

Beteiligte Zentren: FZJ, HZDR, HZB, KIT, GSI

Infrastrukturen: HNF, ER-C, JCNS, IBC, ELBE, HLD, UNILAC, CRYRING@ESR, BESSY II, PETRA III , FLASH, European XFEL

SCHWERPUNKTTHEMA "BATTERIEMATERIALIEN"

KURZBESCHREIBUNG

Ziel ist es, besonders kostengünstige, sichere, langlebige und nachhaltige elektrochemische Energiespeicher für mobile und stationäre Anwendungen zu entwickeln. Im Rahmen gezielter Materialentwicklung sind fortschrittliche Modellierungs- und Charakterisierungstechniken notwendig, um sowohl neuartige Synthesewege als auch Degradationsverhalten sowie mögliche Unzulänglichkeiten aktueller Batteriematerialien zu verstehen. Darauf aufbauend und schon im Programm fortgeschritten werden verschiedene Lösungen für Li-Ionen-Batterien, aber auch neue Batteriekonzepte erarbeitet. Dabei spielt sowohl die atomare wie auch die mesoskopische Struktur der Materialien eine wesentliche Rolle. Die Besonderheit der Materialforschung für Energiespeicher besteht darin, dass alle Komponenten durch den Kontakt mit dem Elektrolyten untereinander in Wechselwirkung stehen. Mit Blick auf die Materialentwicklung bedeutet dies, dass die Optimierung einzelner Zellkomponenten daher nur ein Teilschritt darstellt. Für eine umfassende und abschließende Bewertung der Materialien sind daher Untersuchungen auf Zellebene (möglichst in einer Vollzelle) notwendig. Deshalb ist die Materialentwicklung für Batterien eine eigenständige, im Topic „*Electrochemical Energy Storage*“ des Programms MTET verortete Aufgabe. Während heute bereits klar ist, dass sich Lithium-Ionen-Batterien langfristig am Markt behaupten werden, müssen andere elektrochemische Energiespeicherkonzepte erst noch ihr Marktpotenzial beweisen. Darüber hinaus sollen neue Batteriekonzepte für die langfristige, d.h. saisonale bis jährliche Energiespeicherung entwickelt werden, die in der aktuellen strategischen Planung für die PoF IV derzeit noch nicht adressiert wird. Für eine Bewertung der spezifischen Chancen müssen zunächst alle Zell-

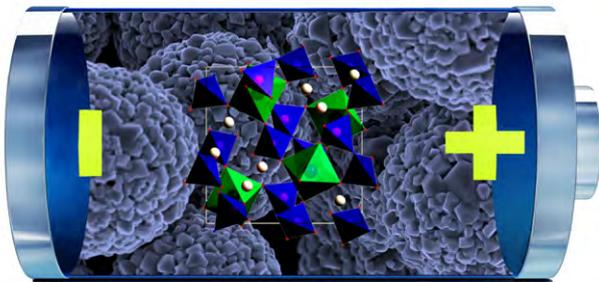


Abb. 6: Aktiv- und Passivmaterialien innerhalb einer Batterie bestimmen die für Anwendungen maßgeschneiderten Leistungsdaten. Nebenreaktionen sind maßgeblich für die Begrenzung der Lebensdauer verantwortlich (Quelle: KIT/Adobestock 56417722_Batterie).

komponenten, also sowohl speicherfähige Aktiv- als auch unterstützende Inaktivmaterialien, noch deutlich weiterentwickelt werden. Bei der Gesamtbewertung werden Nachhaltigkeitsaspekte über den gesamten Lebenszyklus einer Batterie berücksichtigt.

AKTUELLE AKTIVITÄTEN UND MITTELFRISTIGE ZIELE IN DER POF IV

Aktuell werden unterschiedliche Zellkonzepte intensiv erforscht und vor allem folgende Materialaspekte betrachtet:

- Die **Nutzbarmachung metallischer Lithium-Anoden**. Dies setzt Materiallösungen durch Beschichtungen von Elektroden oder der Entwicklung neuer Elektrolyte und Elektrolytzusammensetzungen voraus. Dies ist eine Querschnittsaufgabe für zahlreiche Zellkonzepte lithium-basierter Batterien, also sowohl mit flüssigen Elektrolytformulierungen einschließlich der Etablierung geeigneter Additive mit polymeren Elektrolyten als auch in reinen Feststoffbatterien sowie für Li-Schwefel- oder Li-Sauerstoff-Zellen. Denkbar sind ebenfalls hybride Elektrolyte (z.B. Multischichten-Ansatz).
- Für Lithium-(Ionen-)Batterien sind **neue Kathodenmaterialien** mit höheren Redox-Potentialen sowie höheren Kapazitäten zu entwickeln, um die Energiedichte weiter zu steigern. Dabei ist weitgehend auf Co und auch auf Ni zu verzichten. Höhere Energiedichten erfordern hier auch neue multifunktionelle Elektrolyte (z.B. Polymere und Hybride), die stabiler und leitfähiger sind als der aktuelle Stand. Inaktive Materialkomponenten wie Binder oder Separatoren werden im Hinblick auf umweltverträglichere Zellproduktion und die resultierende Sicherheit optimiert.
- Für Metall-Schwefel-Zellen werden **neue Elektroden** auf Basis von nanostrukturiertem Kohlenstoff und graphen-basierte Aerogele entwickelt, um die gravimetrische Energiedichte weiter zu erhöhen. Dabei sind vor allem Kapazitätsverluste und die niedrige Elektrodenausnutzung zu überwinden. Die Polysulfid-Retention in den leitfähigen mesoskopischen Strukturen ist hier der wichtigste Materialaspekt. Dies kann durch Kombination metallhaltiger Substanzen mit einer polaren Oberfläche zur Erhöhung der Adsorption von Polysulfiden weiter optimiert werden, um stattfindende Redoxreaktionen zu beschleunigen. Untersucht werden auch Separatoren die u.a. mit der Ionenstrahltechnologie hergestellt werden.

- Für Zellchemien, die ohne Lithium auskommen und für manche Anwendungen eventuell eine nachhaltigere Energiespeicherung ermöglichen könnten, sind **Materialkonzepte** zu entwickeln, die aktuelle Limitierungen überwinden. Dazu zählen z.B. auch organische Aktivmaterialien und neue Elektrolytsysteme inklusive Festelektrolyte. Unter anderem werden neue umweltfreundliche Meerwasser-Batterien für den Einsatz in abgelegenen Gebieten entwickelt. Im Fokus stehen hier Metallanoden, z.B. auf der Basis von Magnesium-Legierungen, und neuartige Elektrolytzusätze, um die Effizienz zu erhöhen und eine langfristig zuverlässige Leistung zu gewährleisten. Nachdem die prinzipielle Funktionsfähigkeit im kleinen Maßstab gezeigt wurde, wird ein Hochskalierungsschritt durchgeführt und die Leistungsdaten anhand größerer Zellen evaluiert. Im Laufe der PoF IV wird eine Evaluierung der unterschiedlichen Zellkonzepte vorgenommen und die Arbeiten auf wenige besonders aussichtsreiche Systeme fokussiert.

Bei allen Zellsystemen wird die Materialentwicklung von einer **umfassenden Modellierung** begleitet, um einerseits bei der Interpretation komplexer Messergebnisse zu helfen, aber andererseits auch durch flexible Anpassung einzelner Materialkenngrößen die wichtigsten Einflussgrößen zu identifizieren und so die Materialentwicklung in besonders erfolgversprechende Richtungen zu lenken und zu beschleunigen.

LANGFRISTIGE STRATEGISCHE ZIELE

Das übergeordnete Ziel der Materialforschung für Batterien ist die Bereitstellung einer bestmöglichen **elektrochemischen Zwischenspeicherung von Energie als Fundament nachhaltiger Energietechnologie**. Dabei werden in unterschiedlichen Anwendungen auch verschiedene Zellkonzepte zum Einsatz kommen. Materialaspekte sind entlang der gesamten Wertschöpfungskette von zentraler Bedeutung. Dies beginnt mit der

- Ressourcenverfügbarkeit und Nutzung der Werkstoffe in einer möglichst vollständig geschlossenen Kreislaufwirtschaft, über
- Entwicklung neuer Materialien und Morphologien mit verbesserten Eigenschaften sowie über die
- Prozessierbarkeit der Werkstoffe in der Zellproduktion, bis hin zu den
- materialbedingten Leistungsdaten über die gesamte Lebensdauer und in möglichen Schadensszenarien.

Aufgrund hoher Komplexität und vieler Freiheitsgrade bei den Materialparametern ist eine rein empirische Optimierung nicht zielführend, stattdessen muss die Materialforschung für Batterien auf umfassendem Verständnis zugrundeliegender Wirkungs- und Fehlermechanismen aufbauen:

- Die **Aufklärung aller eigenschaftsentscheidenden Prozesse** innerhalb einer Batterie ist deshalb ebenso ein wichtiges strategisches Ziel der Materialforschung für Batterien, wie auch
- die Entwicklung und Untersuchung neuer Materialsysteme einschließlich
- der Modellierung des Zellverhaltens und kritischer Materialparameter über alle relevanten Zeit- und Längenskalen.
- Die Entwicklung und Validierung moderner Simulationstools, die Prozesse innerhalb einer möglichst durchgängigen Simulationskette von atomarer bis Zellskala beschreiben können, stellt ein wichtiges Anliegen des Schwerpunktthemas „*Batteriematerialien*“ dar. Als Querschnittsthema könnten die entwickelten Modellierungstechniken auf unterschiedliche Batteriekonzepte und dort jeweils relevante Materialien angewendet werden, wobei im Einzelfall methodische Anpassungen notwendig werden.
- In den laufenden Arbeiten werden sowohl neue elektrochemisch aktive Elektrodenmaterialien als auch innovative oder verbesserte Elektrolyte formuliert und synthetisiert, um bessere Leistungsdaten, erhöhte Sicherheit und längere Lebensdauern zu erreichen.

- Auch inaktive Komponenten, wie z.B. Bindermaterialien und Separatoren, werden weiterentwickelt, um die Prozessierbarkeit und Wiederverwertbarkeit der Zellkomponenten zu verbessern und so zur *Nachhaltigkeit* der Batterien beizutragen.
- Für Zellen mit hohen Energiedichten sind die Grenzflächen so zu gestalten, dass sie den extrem oxidativen und reduktiven Betriebsbedingungen langfristig standhalten.
- Zur Schaffung einer validierten Simulationsbasis für die Batterieentwicklung wird eine **engere Kopplung der Simulationstechniken auf unterschiedlichen Skalen** angestrebt, nicht nur um den Transfer atomistischer Informationen aus Dichtefunktionaltheorie und Molekulardynamik auf Kontinuumstechniken der Mikrostruktursimulation von Elektroden und makroskopischer Zelldesignsimulationen systematisch auszubauen, sondern auch um die Materialentwicklung gezielter voranzubringen.

In 10 Jahren ist davon auszugehen, dass es eine **anwendungsorientierte Konsolidierung ausgewählter Zellkonzepte** geben wird. Im Fokus werden dann die Hochskalierbarkeit der Materialien und eine optimale Verarbeitbarkeit bei der Zellproduktion stehen, was auch bei neuen Entwicklungen in der Materialforschung unmittelbar berücksichtigt werden kann. Idealerweise lassen sich die Leistungskennndaten von Batterien dann anhand verfügbarer Modellierungsinstrumente aus fundamentalen Werkstoffparametern ableiten und **so eine beschleunigte Optimierung sowohl der Materialien als auch der Zelldesigns** erreichen. Diese müssen dann materialseitig validiert und in der Praxis umgesetzt werden. Im **Bereich der Materialsimulation könnte langfristig der Einsatz von Quantensimulationstechniken bisher unerreichte Möglichkeiten zur Entwicklung von Energiematerialien bieten** und existierende Dichtefunktionaltechniken ergänzen. Mit Planung und Entwicklung entsprechender Simulationstechniken hochleistungsfähiger Energiematerialien wird derzeit begonnen.

WESENTLICHE ZUKÜNFTIGE AKTIVITÄTEN

- **Hybridisierung von Elektrolyten für Festkörperbatterien**, z.B. Entwicklung polymerer Zwischenschichten für keramikbasierte Elektrolyt/Elektrodenkombinationen.
- Bereitstellung von polymeren Komponenten für Funktionsschichten für variable Zellchemien.
- Entwicklung **effizienter Konzepte zur Hochskalierung von Batteriematerialien**.
- Kombination von Verfahren des maschinellen Lernens und physikbasierten Modellierungen einschließlich neuartiger Quantensimulationstechniken für Energiematerialien. Dadurch werden Simulationen zur Beschreibung von Batteriekomponenten noch realistischer, und erfolgsversprechende Materialkombinationen können zuverlässiger vorgeschlagen und dann über Hochdurchsatzexperimente getestet werden.
- **Entwicklung neuartiger Batteriematerialien mit fortschrittlichen synchrotron- oder neutronenbasierten Charakterisierungsverfahren** in Kombination mit anwendungsorientiertem Design von Batterien der nächsten Generation (z.B. Metall-Schwefel, post-lithium und polymer-basierte Batterien).

AUSGEWÄHLTE INFRASTRUKTURNUTZUNG

- Zur Charakterisierung des Materialverhaltens in kompletten Zellen werden spezielle *in operando*-Verfahren benötigt, die möglichst ortsaufgelöst und unter realen Betriebsbedingungen die maximalen Informationen über die zugrundeliegenden Prozesse liefert. Dies reicht u.a. von elektrochemischen Verfahren über Gas- und Strukturanalytik bis hin zur Beugung und Spektroskopie mittels Synchrotron- (**BESSY II**, **PETRA III**) und Neutronenstrahlung (**MLZ**).
- Für das Hochskalieren der Materialentwicklungen werden u. a. die erweiterten pulverkeramischen Synthesetechnologien und kolloidchemische Verfahren innerhalb des Nanopartikelsyntheselabors des *Helmholtz Energy Materials Foundry (HEMF)* genutzt. Diese Materialien werden im *Battery Technology Center*, dem *NextGenBatt* Labor und dem *Battery Laboratory* für die Fertigung und Evaluierung mittelgroßer und großformatiger Zellen verwendet.

SYNERGIEN

Die Materialcharakterisierung nutzt alle dafür vorhandenen großen Infrastrukturen der Helmholtz-Gemeinschaft. Die Materialforschung für Batterien innerhalb der Helmholtz-Gemeinschaft ist mit allen größeren nationalen Fördermaßnahmen verbunden, entweder durch intensives Zusammenarbeiten oder durch die Koordination durch leitende HGF Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler. Die Helmholtz Materialforschung trägt substantiell durch Materialkompetenz zum BMBF-Dachkonzept „*Forschungsfabrik Batterie*“ und den dazugehörigen Kompetenzclustern bei.

Als ein besonders umfangreiches EU-Projekt sei hier die *large-scale research initiative Battery 2030+* (<https://battery2030.eu/>) genannt, in der zum Beispiel die beschleunigte Materialentwicklung durch Methoden der künstlichen Intelligenz vorangetrieben werden soll.

Elektrochemische Speicher, wie z.B. Batterien, sind ein Beispiel für ein Schwerpunktthema, das entlang der kompletten Wertschöpfungskette von der Idee bis zum marktfähigen Produkt bearbeitet wird. Die geplanten Joint Labs des FB Information, VMD und MDMC, stellen auch hier ein wichtiges Bindeglied dar und unterstützen die Materialentwicklung durch datengestützte Simulation, Etablierung von Quantensimulationstechniken und Charakterisierung.

Ziel: Entwicklung nachhaltiger Speicher höchster Effizienz für die globale Energiewende

Beteiligte FB: Energie, Information, Materie

Beteiligte Zentren: KIT, FZJ, DLR, GSI, DESY, HZB, HZDR

Infrastrukturen: HEMCP, HEMF, KNMF, ER-C, BESSY II, PETRA III, KIT-BaTeC, Energy Lab 2.0, NextGenBatt, Battery Laboratory, UNILAC

SCHWERPUNKTTHEMA „MATERIALIEN FÜR DIE WASSERSTOFFTECHNOLOGIE“

KURZBESCHREIBUNG

Die nachhaltige und effiziente Gewinnung, Speicherung, Verteilung und Nutzung von Wasserstoff und darauf basierende chemische Energieträger aus erneuerbaren, kohlenstoffneutralen Quellen werden einen wesentlichen Beitrag zu unserem zukünftigen Energiesystem leisten, um unsere bisherigen fossil-basierten Produktionswege und Mobilitätskonzepte zu ersetzen. Wasserstoff ermöglicht den Transport und Import von Energie sowie eine flexible Kopplung der Sektoren Strom, Wärme, Industrie und Mobilität. Um die Sektorenkopplung zu realisieren, werden neue Prozess- und Wertschöpfungsketten für Wasserstoff und abgeleitete chemische Energieträger unter Nutzung erneuerbarer Energien entwickelt. Damit kann die Lücke zwischen der fluktuierenden Stromerzeugung aus erneuerbaren Energien und der Nachfrage auf verschiedenen Zeitskalen überbrückt sowie Wasserstoff zur Dekarbonisierung von Mobilität und industriellen Prozessen, z.B. in der Stahl- und Zementherstellung oder Chemieindustrie, bereitgestellt werden. Um bis zum Jahr 2050 klimaneutral zu sein, sind intensive Forschungs- und Entwicklungsanstrengungen für eine großskalige Einführung von Wasserstofftechnologien erforderlich. Durch ein grundlegendes Verständnis von Materialien und Werkstofftechnologien können die erforderlichen Komponenten maßgeschneidert und die Effizienz des Gesamtsystems maximiert werden.

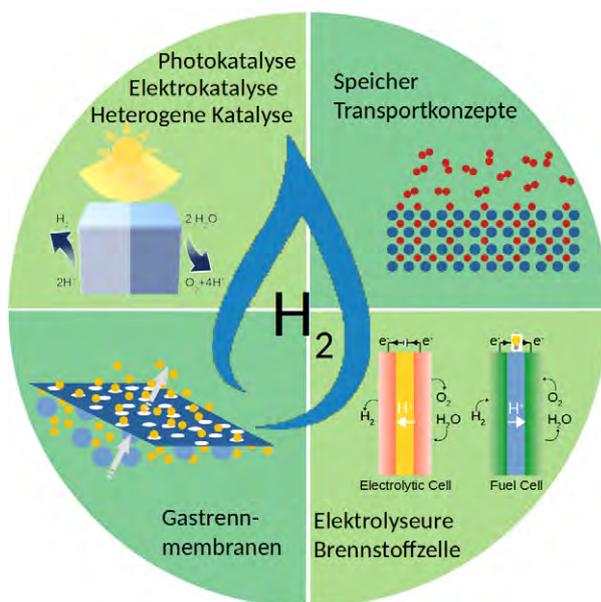


Abb. 7: Thematische Schwerpunkte der Materialforschung für eine nachhaltige und effiziente Gewinnung, Speicherung, Verteilung und Nutzung von Wasserstoff (Quelle: FZJ).

Zudem sind neue Materialien Innovationstreiber und eröffnen zusätzliche neue Perspektiven. Die Materialforschung für die Wasserstofftechnologien umfasst dabei die folgenden zentralen Funktionselemente:

- heterogene Katalysatoren, Elektrokatalysatoren und Photokatalysatoren zur Gewinnung und Umsetzung,
- Membranen zur Separation und Aufbereitung sowie Hydride zur Kompression,
- Ionenleiter und Elektroden für Elektrolyseure und Brennstoffzellen,
- Materialien für Speicher und Transportkonzepte.

Materialaspekte sind entlang der gesamten Wertschöpfungskette von zentraler Bedeutung. Dies beginnt mit der Ressourcenverfügbarkeit und einer Nutzung der Werkstoffe in einer möglichst vollständig geschlossenen Kreislaufwirtschaft, und geht über die Prozessierbarkeit der Werkstoffe für die einzelnen Komponenten, bis hin zu den materialspezifischen Eigenschaftsprofilen über die gesamte Lebensdauer und der Vermeidung möglicher Versagensszenarien. Um bei der hohen Komplexität der Anforderungen schneller zu Lösungen und zur erfolgreichen Implementierung zu kommen, werden *high throughput*-Methoden, einzigartige kritische *in situ* und *in operando*-Experimente sowie umfassende multiskalige Simulationen und Modellierungen kombiniert.

AKTUELLE AKTIVITÄTEN UND MITTELFRISTIGE ZIELE IN DER POF IV

Die anwendungsorientierte Grundlagenforschung der Helmholtz Gemeinschaft adressiert die Aufgaben und Herausforderungen des „7. Energieforschungsprogramms der Bundesregierung“, der „Hydrogen Roadmap Europe“ und trägt zur **Umsetzung der Wasserstoffstrategie der Bundesregierung** bei. Die Wasserstoffforschung erfolgt im Verbund mit Partnern aus der Wirtschaft und Wissenschaft.

(Photo-)Katalytische Prozesse sowie die entsprechende Grenzflächendynamik während der Phasenbildungs- und Reaktionsprozesse spielen eine entscheidende Rolle bei den untersuchten Materialien. Für ein umfassendes Verständnis müssen die Prozesse auf der atomaren und Nanoskala untersucht werden. Dazu werden die Vorgänge *in situ* an der Grenzfläche mit höchster Zeit- und Ortsauflösung in enger Kooperation der verschiedenen Forschungsbereiche untersucht. Elementspezifische Analysen erfolgen unter *operando*-Bedingungen. Diese Experimente liefern wichtige Eingangsparameter für Simulationen und können zur systematischen Validierung von Modellen genutzt werden. Die umfassende

Modellierung unterstützt durch die flexible Variierbarkeit einzelner Materialkenngrößen die Interpretation komplexer Messergebnisse und ermöglicht wichtige Erkenntnisse zu kritischen Einflussgrößen. Durch das **Zusammenspiel von Experiment und Modellierung wird so die Materialentwicklung in besonders erfolgversprechende Richtungen gelenkt und beschleunigt**. Insbesondere stehen die folgenden Aktivitäten im Fokus:

- Entwicklung von **Ni-basierten Elektrokatalysatoren für die Alkalische Membranelektrolyse, geträgerte Katalysatoren für die PEM-Elektrolyse** und neue Konzepte wie Exsolution für die Hochtemperaturtechnologie.
- Modellierung photo-elektrochemischer Bauelemente und Identifizierung von Leistungsgaps.
- Entwicklung von synchrotron-basierten *in situ*- und *operando*-Methoden für Untersuchungen an festflüssig Grenzflächen.
- Entwicklung von **Dünnschichtkatalysatorsystemen** anhand von Pulver-Katalysatoren.
- Konzeptioneller Entwurf und Prototypenentwicklung von skalierbaren und stabilen photo-elektrochemischen Bauelementen und von integrierten photovoltaisch betriebenen Elektrolyse-Vorrichtungen für die **solare Wasserspaltung**.
- *In situ*-Charakterisierung von Reaktiven Hydridkompositen mit Arbeitstemperaturen zwischen 100°C und 200°C. Einbettung von Speichermaterialien in Polymermembranmatrices zur **Sicherung der Langzeitstabilität**. Untersuchung von Aktivierungsproblemen und Reaktionsgeschwindigkeitsbestimmen den Schritten in interstitiellen Metallhydriden mittels atomistischer und Phasenfeld-Simulationen.
- Ermittlung der Einsatzcharakteristika CO₂-selektiver Membranen zur **Aufbereitung unterschiedlicher Prozessgasströme**: H₂-haltige Bio- und Industriegase, Abgase, Erdgas.

LANGFRISTIGE STRATEGISCHE ZIELE

Das übergeordnete Ziel der Materialforschung zum Schwerpunktthema „*Materialien für die Wasserstofftechnologie*“ ist die Bereitstellung maßgeschneiderter Materialien und Werkstofftechnologien für die umfassende Implementierung einer nachhaltigen und effizienten **Energie- und Rohstoffwirtschaft auf der Basis von Wasserstoff als grünem Energieträger**. Ein zentrales Ziel ist dabei ein umfassendes und tiefgreifendes Verständnis der komplexen Vorgänge in den verschiedenen (z.T. multifunktionalen) Materialien über deren gesamten Lebenszyklus. In Hinblick auf die

verschiedenen Anwendungsbereiche soll ein entsprechend breites Portfolio an Materialien und Prozesstechnologien zur Verfügung gestellt werden, die sich zu effizienten Gesamtsystemen kombinieren lassen, wobei neben den optimalen Eigenschaftsprofilen stets auch die Aspekte der Ressourcenverfügbarkeit und Recyclingfähigkeit im Sinne einer nachhaltigen Kreislaufwirtschaft Berücksichtigung finden müssen. Die spezifischen strategischen Ziele für die wesentlichen Bausteine und Komponenten der Wasserstofftechnologie sind:

- langzeitstabile und kosteneffiziente heterogene Katalysatoren, Elektrokatalysatoren und Photokatalysatoren zur **Gewinnung und Umsetzung von Wasserstoff**,
- Membranen zur effizienten Separation und **Aufbereitung von Wasserstoff** sowie wartungsarme Kompressoren auf Basis von Hydriden,
- schnelle Ionenleiter und korrosionsbeständige Elektroden für Elektrolyseure und Brennstoffzellen,
- effiziente Trägermaterialien zur effizienten, kompakten und sicheren **Speicherung von Wasserstoff**,
- Entwicklung von multiphysikalischen Modellierungs- und Simulationstools, die die virtuelle Materialentwicklung komplexer Komponenten (z.B. Elektrode, Transportschicht, bis hin zur Brennstoffzelle) ermöglichen.

In den kommenden fünf Jahren konzentrieren sich die Aktivitäten auf Weiterentwicklung der bisher besten Materialien sowie die Skalierung der Synthese- und Prozessmethoden, um funktionsfähige Technologie-Demonstratoren präsentieren zu können, die die notwendige schnelle Implementierung ermöglichen. Parallel werden Analysen und Modellierungen zur Erweiterung des grundlegenden Verständnisses der Prozesse und Mechanismen durchgeführt, um mittel- bis langfristig verbesserte und neuartige Materialien zur Verfügung zu stellen, mit denen die Energieeffizienz der Bausteine für die Wasserstofftechnologie weiter gesteigert und die Kosten weiter gesenkt werden können. Speziell geht es dabei um:

- Demonstration von langlebigen und leistungsfähigen Brennstoffzellen und Elektrolyseuren mit sehr niedriger Edelmetall-Beladung, mit alkalischer Technologie auch komplett edelmetallfrei.

- Wissensbasierte **Entwicklung neuartiger Dünnschicht-Katalysatoren für die nachhaltige Produktion und Transport von Wasserstoff**, Chemikalien und alternativen Kraftstoffen durch die synergetische Bündelung von Kompetenzen in der Dünnschichttechnologie und Katalyse zur Anwendung im industriellen Maßstab.
- **Prototypentwicklung von aussichtsreichen Photo-, Elektro- und Chemo-Dünnschichtkatalysatorsystemen** mit hoher Durchsatzrate und Entwicklung von kosteneffizienten Verfahren für metalloxid-basierte Tandem-Materialsysteme zur photoelektrochemischen Wasserspaltung.
- **Effiziente Polymer- und Keramikmembranen** für die Aufreinigung von Wasserstoff und zur Integration in Membranreaktoren für Power-to-X Technologien. Polymermembranen für die Abtrennung von CO₂ von H₂ sowie für die Abtrennung von H₂ aus dem Erdgasnetz werden für Trennaufgaben in anwendungsnahen Forschungsaktivitäten eingesetzt und ihre Integrierbarkeit mit anderen Verfahrenstechnologien wird untersucht.
- Grundlegende **Analyse neuer Materialsysteme für die Wasserstoffspeicherung** mit Hilfe von kritischen *in operando*-Experimenten und Computersimulationen: Reaktiven Hydridkompositen und in H₂-selektiven Membran-Scaffolds für Temperaturen < 100°C.
- Entwicklung eines grundlegenden Verständnisses der Reaktionsmechanismen an Fest-Flüssig-Grenzflächen in skalierbaren Dünnschichtkatalysatorsystemen auf molekularer Ebene, in Hinblick auf das Design neuartiger Chemo-, Elektro- und Photo-Katalysatoren mittels *in operando*-Analyse und Modellierung.
- Identifikation von **neuartigen, chemisch stabilen metalloxid-basierten Halbleitern** mit Bandlücken zwischen 1,5 – 2,1 eV für Anwendung als „Top“-Absorber in photo-elektrochemischen Stapelzellen und Analyse der wesentlichen Mechanismen für die solare H₂-Gewinnung und CO₂-Reduktion.
- Eine **neue Generation temperaturstabiler Polymer- und Keramikmembranen** erlaubt die gezielte Zudosierung von Edukten und Abtrennung von Produkten aus Membranreaktoren bei Temperaturen bis 300°C bzw. 900°C und wird so zu einer „*enabling technology*“ für die Prozessintensivierung in der Wasserstoffwirtschaft.
- **Wartungsarme Kompressoren auf Basis von Hydriden** mit geeigneter Thermodynamik und Temperatur-/Druck-Charakteristik.
- **Neue beständige Polymermembranen** mit hoher Ionenleitfähigkeit für Elektrolyseure und Brennstoffzellen im Temperaturbereich um 120°C für ein vereinfachtes Wärme- und Wasser- bzw. Feuchtigkeitsmanagement.
- **Neue Ionenleiter** (Anionen oder Kationen) für Brennstoffzellen und Elektrolyseure im Temperaturbereich 300 bis 500°C für industrielle Anwendungen.
- Materiallösungen ermöglichen Reversibilität der Zelltechnologie für die Herstellung bzw. Umsetzung von Wasserstoff (flexibler Wechsel von Brennstoffzellen- und Elektrolysemodus).
- Umfassendes Portfolio von Material- und Speichertanksystemen ermöglicht kostengünstige, kompakte und sichere Speicherung von Wasserstoff in stationären und mobilen Anwendungen (Sektorenkopplung, saisonale Speicherung, Schiffe, Züge, Busse).

WESENTLICHE ZUKÜNFTIGE AKTIVITÄTEN

- Entwicklung von neuartigen maßgeschneiderten Katalysatoren auf Dünnschichtbasis zur großskaligen Produktion und Umwandlung von Wasserstoff, sowie chemischen Energieträgern und Prozessen mittels eines integrativen wissenschaftlichen Ansatzes: Digitale Katalyse, *in situ*- & *in operando*-Analyse, Dünnschichtverfahren, Skalierung & Prototypentwicklung (Projekt CatLab, gemeinsam mit MPG).
 - **Core-shell-Katalysatoren** mit Langzeitstabilität in Polymer-Brennstoffzellen.
 - **Einrichtung digitaler Bibliotheken** zur Unterstützung der Implementierung von Tandemphotoelektrochemischen Materialsystemen mittels kinetischen Spritzens und anderen skalierbaren Herstellungsverfahren.
 - Entwicklung von kritischen nanofabrizierten experimentellen Modellelektroden für die Validierung von Computersimulationen der Elektrodeneigenschaften.
 - Entwicklung von **Reaktiven Hydridkompositen** mit reduzierten Arbeitstemperaturen und Kombination mit Polymer-Scaffolds durch die Verbindung von *operando*-Experimenten mit parallelen Computersimulationen.
- Langfristig sollen optimale Lösungen für die verschiedenen Applikationen bereitgestellt werden:
- **Langzeitstabile und kosteneffiziente heterogene Katalysatoren mit minimalem Edelmetallanteil.**
 - Kostengünstige Photokatalysatoren mit hoher Effizienz und geeignete Konzepte zum Korrosionsschutz für die Gewährleistung der Langzeitstabilität.
 - Demonstration von langlebigen, kosteneffizienten, großflächigen Prototypzellen für die autarke solare Wasserspaltung.

- Neue Polymermembranwerkstoffe für die H₂-Abtrennung bei hohen Temperaturen sowie optimierte und anwendungsfallsspezifische CO₂-Abtrennung durch thermisch umgelagerte Polymere oder Facilitated Transport Membranen.
- **Erforschung von Prozessintensivierungsansätzen** durch den Einsatz von Membranen in Membranreaktoren und integrierten Verfahren.
- Erforschung neuartiger metalloxid-basierter Halbleiter und Optimierung ihrer Wirkungsgrade und Stabilität.
- Anwendung von synchrotron-basierten *in situ*- und *in operando*-Methoden zur Untersuchungen an Fest-Flüssig-Grenzflächen.
- Konzeptioneller Entwurf und Prototypenentwicklung von skalierbaren und stabilen photo-elektrochemischen Bauelementen.

AUSGEWÄHLTE INFRASTRUKTURNUTZUNG:

Die **Plattformen HEMF und HEMCP** stellen umfangreiche und z.T. einzigartige Infrastrukturen für die Synthese und Analyse innovativer Materialien für die Wasserstofftechnologie bereit. Zur Analyse des Materials werden speziell entworfene und einzigartige *in situ*- und *in operando*-Umgebungen an Synchrotron- (**BESSY II, EMIL, PETRA III**) und Neutroneneinrichtungen (**MLZ - FRM II**) genutzt, die zeit- und orts aufgelöst und unter realen Betriebsbedingungen direkten Einblick in die zugrundeliegenden Prozesse und Mechanismen liefern. Beispielsweise werden Fest-Fest- und Fest-Flüssig-Grenzflächen elektrochemischer und photoelektrochemischer Materialsysteme untersucht, um neue photoaktive Materialien zu identifizieren und zur Bereitstellung kostengünstiger und effizienter photoelektrochemischer Zellen beizutragen. Weitere Infrastrukturen wie das **Polymer and Hydrogen Technology Centre (PHTC)** erlauben die Synthese nanoskaliger Materialien und neuer Polymere bis in den Pilotmaß-

stab zur Herstellung von größeren Speichertanks und Membranen sowie deren Erprobung im technischen Maßstab über weite Temperatur- und Druckbereiche. Im **Membrane Center** werden Membran-Systeme für neue energieeffiziente Technologien entwickelt und untersucht, bspw. für katalytische Membranreaktoren und neuartige Brennstoffzellen. Verschiedene Herstellprozesse, wie Foliengießen, PVD- und Tauchbeschichtungsverfahren werden eingesetzt und die neuen Materialien und Komponenten umfassend charakterisiert hinsichtlich Struktur und Performance.

SYNERGIEN

Im Bereich der Materialforschung für die Wasserstoffgewinnung, -aufbereitung und -speicherung ergänzen sich die Aktivitäten im FB Energie, im FB Information sowie im FB Materie komplementär und nutzen gemeinsam die besonderen Infrastrukturen (HEMF, HEMCP, PHTC, ...).

Die Joint Labs VMD und MDMC (FB Information) unterstützen die Materialentwicklung durch multiskalige umfassende Modellierung und Simulation sowie durch intelligente datengestützte Charakterisierungs- und Auswertemethoden. Dabei wird in einem skalenübergreifenden Ansatz die Verbindung zwischen den grundlegenden Materialentwicklungen über neue Verfahrenstechnologien bis hin zur Optimierung des Leistungsprofils kompletter Module und Systeme erarbeitet und parallel mit verschiedenen Modellierungs- und Simulationsansätzen verknüpft.

Alle Aktivitäten sind eng eingebunden in europäische Forschungsvorhaben im Rahmen von Hydrogen Europe und die Aktivitäten des „Hydrogen Technology Collaboration Programmes“ (TCP) der Internationalen Energieagentur (IEA), beispielsweise in Task 40 „Energy Storage and Conversion Based on Hydrogen“.

Ziel: Materialforschung für nachhaltige Gewinnung, Speicherung, Verteilung und Nutzung von Wasserstoff für die Energiewende

Beteiligte FB: Energie, Information, Materie

Beteiligte Zentren: FZJ, DLR, KIT, HZG, HZB, UFZ, DESY, GFZ, HZDR, GSI

Infrastrukturen: HEMCP, HEMF, KNMF, ER-C, BESSY II, PETRA III, KIT-BaTeC, Energy Lab 2.0, PHTC, Membrane Center, UNILAC

SCHWERPUNKTTHEMA „PHOTOVOLTAISCHE MATERIALIEN“

KURZBESCHREIBUNG

Photovoltaik (PV), die direkte Umwandlung von Sonnenlicht in elektrische Energie, ist eine der technologischen Säulen für die künftige Versorgung mit erneuerbarem Strom in Deutschland und weltweit.

Um das strategische Ziel, das Anbieten der niedrigsten Stromkosten (LCOE) aller Energietechnologien zu erreichen, ist die Entwicklung photovoltaischer Materialien, Prozesse und Bauelement-Konzepte zur Realisierung einer flächenbezogenen Wirkungsgradsteigerung mit neuen Halbleitersystemen eine unabdingbare Voraussetzung. Innovationen aus der Materialforschung in den beteiligten Helmholtz-Zentren sind ein Schlüssel bei der Lösung dieser Zukunftsaufgabe.

AKTUELLE AKTIVITÄTEN UND MITTELFRISTIGE ZIELE IN DER POF IV

Dünnschichtsolarzellen basierend auf hybriden Halid-Perowskiten erzielen Rekordwirkungsgrade. Allerdings enthalten diese Absorbermaterialien das Element Blei und sind nicht langzeitstabil. Deshalb fokussieren aktuelle Forschungsarbeiten auf den Ersatz von Blei bei einer signifikanten Verbesserung der Langzeitstabilität des Materials sowie auf neue Halid-Perowskit-basierte Materialien und Prozesse für hocheffiziente Tandem-Solarzellen.

- Entwicklung eines grundlegenden Verständnisses für das **Design und die Struktur-Eigenschaftsbeziehungen** von defektfreien und defekttoleranten Verbindungshalbleitern, insbesondere das Zusammenspiel von statischer und dynamischer Struktur, für ein besseres Verständnis der Langzeit-Materialstabilität und damit der Stabilität der Bauelemente.
- Entwicklung von neuen Strategien zur **Stabilisierung der Halid-Perowskit-Grenzflächen**, insbesondere mittels hybrider Heterostrukturen und 2D-/3D-Perowskit-Heterostrukturen sowie Entwicklung von **stabilen und kompatiblen Ladungsträgerextraktionsschichten**, die sowohl Korngrenzen als auch Oberflächenzustände effektiv passivieren und deren Bandanpassung optimal ist. Diese Aktivitäten werden durch die Charakterisierung der chemischen, elektronischen und strukturellen Oberflächen-, Grenzflächen- und Volumeneigenschaften an den dedizierten Infrastrukturen (s.u.) unterstützt.

- Entwicklung einer mikroskopischen und makroskopischen Beschreibung des **Kristallisationsverhaltens** von Halid-Perowskiten aus der Lösung mittels eines experimentellen und eines Multiskalen-Simulations-Ansatzes. Darauf basierend werden zuverlässige und nachhaltige **vollständig lösungsprozessierten Halid-Perowskitsolarzellen** mit hoher Effizienz und Lebensdauer, incl. der Zwischenschichten und Elektroden, entwickelt und optimiert. Hier kommen insbesondere Hochdurchsatzverfahren zur Anwendung.
- Entwicklung neuer Prozesse zur kostenreduzierten großflächigen Herstellung von **Halid-Perowskit-(Tandem)-Solarzellen** (Tintenstrahldruck, Schlitzdüsenverfahren und Ko-Verdampfung).

Um die zukünftigen Herausforderungen an die Photovoltaik als eine der technologischen Säulen für die Versorgung mit erneuerbarem Strom zu meistern steht die Entwicklung neuer, innovativer Absorber- und Kontaktmaterialien für hocheffiziente Solarzellen im Vordergrund. Eine Grundlage dafür ist das Experiment-basierte und rechnergestützte Materialscreening.

- Untersuchung der Struktur-Eigenschafts-Beziehungen **neuer Absorbermaterialien**, insbesondere für den Einsatz in Tandem-Solarzellen (z. B. Widegap-Chalcogenide).
- Entwicklung **kombinatorischer Materialforschungsmethoden** (z.B. kombinatorischer Inkjetdruck, Aerosoldruck, slot die-Beschichtung, Pulsed Laser Deposition, beschleunigte Materialanalytik) zur Erstellung und Analyse von **Materialbibliotheken neuer photovoltaischer Materialien** bzw. Materialkombinationen mit Relevanz für hocheffiziente Solarzellen.
- Entwicklung einer Methodologie für das Reporting von Effizienz und Stabilitätsdaten für „*emerging*“ PV-Materialien.

Neu entwickelte Materialien und Konzepte müssen systematischen Tests in Solarzellen und opto-elektronischen Bauteilen unterworfen werden.

- Entwicklung **neuer Bauelement-Konzepte und -Architekturen** zum verbesserten Energieertrag unter realen Bedingungen. Dabei kommen optische Simulationen gekoppelt mit Energieeintragssimulationen zum Einsatz, die der Evaluation und Optimierung neuer Bauelement-Konzepte (z.B. 3-Terminal) und Lichtmanagement-Konzepte dienen.

- Entwicklung/Optimierung neuer **analytischer Methoden** für die Untersuchung von Materialeigenschaften und der Langzeitstabilität **unter Betriebsbedingungen**. Für die fortschreitende Entwicklung eines „autonomen Labors“ und „autonomer Herstellungsverfahren“ ist die **gezielte Implementierung von intelligenten diagnostischen Methoden und Erfassung sowie KI-basierte Analyse** von Material- und Prozessdaten notwendig.

Die Auswirkungen von Degradationsprozessen auf die Leistung photovoltaischer Systeme werden ein wichtiges Forschungsgebiet sein, da die Anwesenheit kritischer Schadstoffe in bestimmten Umgebungen ihre Lebensdauer drastisch verkürzen zu einem vorzeitigen Ausfall führen kann.

- **Untersuchung der Korrosion** verschiedener Schlüsselkomponenten in relevanten Umgebungen und Entwicklung prädiktiver Modelle.
- Die **Demonstration von photovoltaik-betriebenen Wasseraufbereitungssystemen** (ohne Batterien) in Afrika ist zusammen mit FB Erde und Umwelt („Bioeconomy“) geplant.

LANGFRISTIGE STRATEGISCHE ZIELE

- Die Helmholtz-Materialforschung fokussiert auf die **Entwicklung und Realisierung neuer, hocheffizienter Photovoltaik-Technologien und Bauelement-Konzepte** mit Wirkungsgraden über 30%. Damit werden die derzeitigen Wirkungsgrad- und Stromentstehungskostengrenzen überwunden. Wichtige Aspekte für neue PV-Technologien sind nicht nur die Produktionskosten der Module, sondern auch ihre Langzeitstabilität.
- **Erschließung neuer Material-Funktionalitäten**, welche die Schlüsselkriterien der *Nachhaltigkeit*, Ressourcenschonung und kosteneffektiven Produktion erfüllen und eine Systemintegration ermöglichen, insbesondere mit Hinblick auf einen weltweiten Einsatz im Tera-Watt-Maßstab. Das betrifft nicht nur photovoltaische Absorbermaterialien, sondern die gesamte Palette von Materialien, die zur Herstellung von Solarmodulen benötigt wird (z.B. für Kontakte, elektrische Verbindungen, Verkapselung).
- Entwicklung experimenteller **Hochdurchsatz-Methoden** für die Erfassung physikalischer Kenngrößen neuer photovoltaischer Materialien sowohl im Labor als auch an Großgeräten. Für die Suche nach neuen photovoltaischen Materialien werden Methoden für die beschleunigte Materialentwicklung (z. B. computational und experimentelles Hochdurchsatz-

Materialscreening mit Stage-Gate-Prozess) etabliert und kostengünstige, skalierbare und ressourcenschonende Schichtherstellungsprozesse entwickelt. Zusätzlich werden dedizierte Charakterisierungs-umgebungen, in denen gezielt verschiedene Analytikansätze mit *in system-* bzw. *in-situ-*Messanlagen kombiniert werden, entwickelt. Als Komplettierung sind KI-basierte Algorithmen für die quantitative Erfassung und Interpretation von vorhergesagten und gemessenen Kenngrößen der Vielzahl von Materialien und Materialkombinationen erforderlich.

- Entwicklung von **Materialbibliotheken** mit neuen photovoltaischen Materialien bzw. Materialkombinationen und Aufbau eines datenbank-basierten Datenmanagements mit Relevanz für hocheffiziente Solarzellen. Sie dienen auch der Erfassung und dem Austausch von photovoltaik-relevanten Forschungsdaten zwischen den einzelnen Helmholtz-Zentren. Damit wird es möglich sein, die „*nächste Generation*“ von Absorbermaterialien verschiedener Bandlückenbereiche für Multi-Schicht Solarzellen (z. B. Triple-Solarzellen) zu identifizieren.
- Vorhersage des realen **Effizienz- und Lebensdauerpotentials** von neuen photovoltaischen Materialien anhand der chemischen / kristallographischen Struktur basierend auf den zentralen Materialparametern Absorption, Mobilität und Ladungsträgerlebensdauer. Für die Funktionalität von Grenzflächen

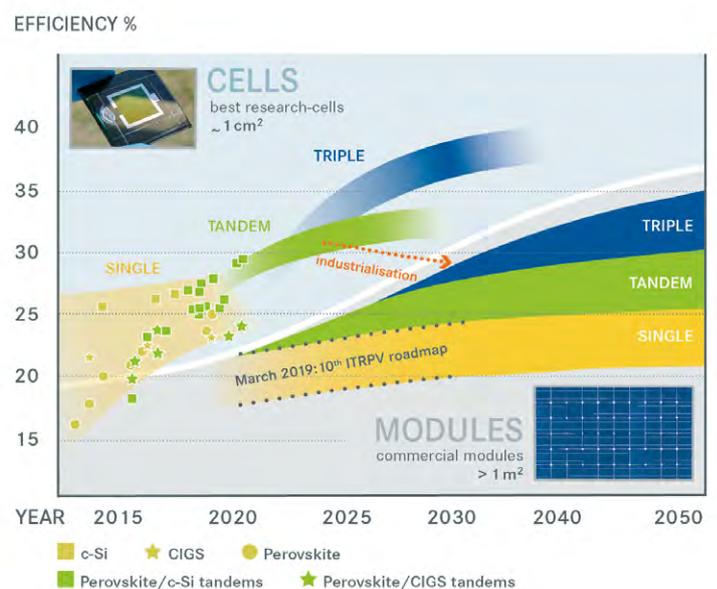


Abb. 8: Roadmap für PV Effizienzen von Solarzellen (1 cm²) und kommerziellen Modulen (> 1 m²) (Quelle: HZB, based on Nat. Energy (2017) 16 196; Adv. Energy Mater. (2020) 1904102).

(z.B. zwischen Absorber und Kontaktmaterialien) werden analoge Kenngrößen (z.B. Selektivität und Passivität) bestimmt.

- Etablierung von **cradle-to-cradle Lebenszyklusanalysen** photovoltaischer Materialien, Bauelementen und Technologien. Photovoltaische Materialien und Prozesse müssen in Übereinstimmung mit allen nationalen und internationalen Anforderungen sein, die erforderlich sind, um die Photovoltaik als dominierende erneuerbare Energiequelle mit Systemrelevanz zu etablieren. Überdies muss die Langzeitstabilität und die Umweltfreundlichkeit von Prozessen und Materialien in die Gesamtbewertung einfließen.

WESENTLICHE ZUKÜNFTIGE AKTIVITÄTEN

Die informationsgetriebene Material- und Bauelementforschung wird über die PoF IV hinaus zentral für die Entwicklung zukünftiger Photovoltaik-Technologien sein. Ein strategisches Ziel muss es daher sein, in diesem Bereich Kernkompetenzen und Methoden auszubauen:

- **Ausbau der Helmholtz-Plattformen** (z. B. AMANDA) und der Datenbanken sowie Pilotprojekte (z. B. „*in situ*-Charakterisierungsplattform für flüssigprozessierte Perowskit-Solarmodule“ (IN-SIPERO)). Die einzigartige Kombination von Materialsynthese und synchrotron-röntgenstrahlungsbasierter Analytik an der Infrastruktur EMIL@BESSY II ist von entscheidender Bedeutung bei der Erreichung der strategischen Ziele
- Die **Integration grundlegender Prinzipien des maschinellen Lernens**, die den Durchsatz bzgl. der Datenakquise und -auswertung signifikant verbessern, ist bei der Untersuchung der Eigenschaften kombinatorischer Materialbibliotheken zwingend notwendig. Darüber hinaus müssen modellierte und gemessene Materialeigenschaften (**digital twin**) mit externen Datenbanken und Standardcharakterisierungsdaten verknüpft werden, um ein ganzheitliches Verständnis der Beziehungen zwischen grundlegenden physikalischen Eigenschaften und der Leistungsfähigkeit von Solarzellen oder deren Komponenten zu erhalten.

Fortschritte bei der Optimierung der Heterostruktur von photovoltaischen Bauelementen werden zudem durch die gezielte Untersuchung neuer Materialien für Kontakt- und Transportschichten in Verbindung mit neu entwickelten Absorbermaterialien erwartet:

- Anwendung und gezielte Anpassung von beispielsweise 2D-Materialien in Verbindung mit ihren 3D-Analoga.

- Anwendung **zerstörungsfreier tiefenauflösender röntgenspektroskopischer Charakterisierungstechniken** in Kombination mit *in system-* / *in situ*-Probenpräparation bzw. -behandlungen.
- Untersuchung des **Einflusses von realen Betriebsbedingungen auf die chemische und elektronische Struktur** in der Solarzelle und an deren Grenzflächen (*in operando*-Untersuchungsmethoden), ausschlaggebend, u. a. für das Verständnis von Alterungsprozesse in Solarzellen und die Entwicklung von Mitigationsstrategien.

Neue Generationen von Photovoltaikmaterialien werden noch vielfältiger und variabler einsetzbar sein und die globale Integration der PV in das tägliche Leben vorantreiben. Neue Technologien für die solare Energiewandlung, wie z. B. solare Laser, die mittels lumineszenter Solarkonzentratoren gepumpt werden oder photokatalytische Mikroreaktoren für Luft- bzw. Wasserbehandlung, werden sich entwickeln. Energieautonomie in der Industrie, im Transport und im Gebäude benötigen zusätzliche Technologien mit hoher Variabilität und hohem Integrationspotential ohne Einbußen bei Effizienz, Lebensdauer und Kosten.

AUSGEWÄHLTE INFRASTRUKTURNUTZUNG

Der von **BESSY II** zur Verfügung gestellten großen Energiebereiches des Röntgenlichts erlaubt die Untersuchung von Materialoberflächen, aber auch von tief vergrabenen Schichten und Grenzflächen. Darüber hinaus können die chemische, atomare und elektronische Struktur der photovoltaischen Materialien mittels der vielseitigen Instrumentierung an den Beamlines grundlegend untersucht werden.

In **EMIL@BESSY II** können verschiedene Energie-Materialien hergestellt und mit einer Kombination verschiedener Röntgen- und elektronen-basierter Analysetechniken charakterisiert werden. Das ermöglicht *in system-*, *in situ-* und *in operando*-Messungen an Schichtsystemen, die u. a. in industrierelevanten Depositionsanlagen hergestellt werden.

Insbesondere Experimente an **FLASH** und **European XFEL** können wichtige Beiträge zum Verständnis der Ladungstrennung während photoangeregter Prozesse, deren Lebensdauern extrem kurz sind, liefern, um gezielt nach rationalen Methoden Materialien zu optimieren. Für die Analyse der atomaren und elektronischen Struktur sowie kompletter Bauelemente steht eine breite Palette analytischer Techniken im härteren Röntgenbereich an **PETRA III** zur Verfügung.

Die **Helmholtz Energy Materials Foundry (HEMF)** ist eine große, kollaborative Forschungs- und Entwicklungsplattform, die sich der Synthese neuer und verbesserter Materialien für Energieumwandlungs- und Speicheranwendungen widmet. HEMF dient der wissenschaftlichen Gemeinschaft und wird als internationale Nutzereinrichtung für akademische und industrielle Partner betrieben. An HEMF sind sechs Helmholtz-Zentren beteiligt (HZB, FZJ, DLR, KIT, HZG, HZDR).

Die **Karlsruher Nano Micro Facility (KNMF)** bietet Zugang zu Laboren für Micro- und Nanostrukturierung sowie im Labor für Mikroskopie und Spektroskopie zu einzigartigen Herstellungs- und Charakterisierungstechnologien.

Die **Autonomous Materials and Device Application Plattform (AMANDA)** ist eine universelle Plattform zur automatischen und autonomen Untersuchung materialwissenschaftlicher Fragestellungen. Sie vereint ein generisches Forschungsautomatisierungssystem mit einer automatisierten MAP-Anlage (Material Acceleration Platform) zur Herstellung und Charakterisierung Solarzellen im Labormaßstab. Mit ihrem Toolset kann die AMANDA-Plattform die Material- und Prozessentwicklung für lösungsverarbeitete Dünnschichtsolarzellen erheblich beschleunigen.

SYNERGIEN

Für die photovoltaische Materialforschung sind Synergien mit anderen Topics im Helmholtz-Programm MTET von Bedeutung (Topic 3: Subtopic „Solar Fuels“ sowie Topic 5 bzgl. der Lebenszyklusanalyse). Weitere Synergien bestehen insbesondere mit den Forschungsbereichen Materie und Information bzgl. Nutzung der Großforschungseinrichtungen (insbes. *in situ*- und *in operando*-Methoden) und der digitalen Materialentwicklung.

Bezüglich des *in situ* Monitoring des Wachstumsprozesses der Absorberdünnschichten mittels Multiparameter-Röntgenstrahlungsbasierten Methoden bestehen auch Synergien zu MAXIV, der Synchrotronstrahlungsquelle in Schweden.

In den Graduiertenschulen **MatSEC**, **HyPerCells** sowie der **Helmholtz International Research School HI-SCORE** (Zusammenarbeit mit Israel) bestehen vielfältige Synergien zur Forschung an photovoltaischen Materialien.

Die kombinatorische Materialforschung wird weltweit mit viel Erfolg betrieben. Synergien bzgl. photovoltaischer Materialien bestehen mit HI-ERN, dem NREL sowie MIT in den USA, aber auch der University of Toronto, Kanada.

Weltweit arbeiten Forscher an (hybriden) Halid-Perowskiten, der Basis hocheffizienter Dünnschichtsolarzellen. Synergien bestehen auf diesem Gebiet mit Gruppen im SFB „Perovskite Semiconductors: From Fundamental Properties to Devices“ und dem IPVF/CNRS, Frankreich. Diese Materialien bieten sich auch für Tandem-Solarzellen an. Hier bestehen Synergien mit dem Institut für Solarenergieforschung in Hameln (ISFH), dem Zentrum für Sonnenenergie- und Wasserstoff-Forschung Baden-Württemberg (ZSW), der Oxford University, UK, und der Australian National University

WISSENSTRANSFER MIT METHODEN-PLATTFORMEN

Mit der Methoden-Plattform MAP wird eine Zusammenarbeit zur Erstellung einer gemeinsamen Datenbank zu perowskitischen Halbleitermaterialien entwickelt. Diese kann dann mit neuen aktuellen Solarmaterialien erweitert werden.

Ziel: Entwicklung neuer Konzepte und Materialien für hocheffiziente und langzeitstabile Solarzellen

Beteiligte FB: Energie, Information, Materie

Beteiligte Zentren: HZB, FZJ, KIT, HZG

Infrastrukturen: BESSY II, EMIL@BESSY II, PETRA III, HEMF, HEMCP, KNMF, AMANDA, FLASH, European XFEL

SCHWERPUNKTTHEMA „MATERIALIEN FÜR DIE GESUNDHEIT“

KURZBESCHREIBUNG

Die Entwicklung neuer Materialien und Materialsysteme für die Lebens- und Gesundheitsforschung ist Treiber für Innovationen im Bereich Diagnostik, Therapie, Prävention, und der Erforschung von Krankheitsmechanismen. Dazu gehören: (1) Verständnis der **Bio-Material Wechselwirkungen** (*Bio-instruktive Materialien*). (2) **Intelligente Trägersysteme** (*Advanced Delivery Systems*) für Medikamente und Diagnostika. (3) **Regenerative Therapien** und *in vitro*-Testsysteme (*künstliche Gewebe und Organe*). (4) **Multifunktionale Implantate** (Abb. 9).

Für die Grundlagenforschung stellen sich hierbei zahlreiche Herausforderungen, da die Interaktion mit lebenden Systemen mit einer beträchtlichen Zunahme an Komplexität verbunden ist. Der interdisziplinäre Forschungsansatz umfasst das Design von Materialien mit maßgeschneiderter Multifunktionalität, die Wechselwirkung mit biologischen Materialien und das Materialverhalten, inklusive der Abbauprozesse über die Gesamtlebensdauer im Organismus. Materialverhalten, Funktion und Abbau müssen über die Lebensdauer im Organismus betrachtet werden. Integrative Strukturanalytik erlaubt es die Wechselwirkung und Grenzflächen zwischen biologischem Gewebe und anorganische Materialien mit hoher räumlicher und zeitlicher Auflösung zu charakterisieren.



Abb. 9: Neue Materialien und Anwendung für Gesundheitsforschung und Medizin (Quelle: HMGU).

In der translationalen Biomaterialforschung werden intelligente biohybride Trägersysteme verfolgt, um Wirkstoffe und Diagnostika gezielt und kontrolliert freizusetzen („*smarte*“ Medikamente) und zur Überwindung biologischer Barrieren. Transformative Möglichkeiten für die moderne Medizin ergeben sich durch Materialien, die *in vivo* Regenerationsprozesse modulieren können. Diese dienen auch zur Herstellung künstlicher funktionaler Gewebe und Organe für die Transplantation in den Patienten und, in Form von biologischen Barrieren, Organoiden und Organ-on-Chip für pharmakologische Screens, und damit als Alternative oder Ergänzung zu Tierversuchen. Multifunktionale Materialien ermöglichen abbaubare sowie aktorisch und sensorisch funktionale Implantate insbesondere für minimalinvasive Therapien.

Die Entwicklung neuer Verfahren zur Ermittlung von *in vivo*-Daten (Sensorik, Bildgebung) liefern völlige neue Möglichkeiten zur verbesserten Prävention, Diagnostik und Therapie. Dies sollte idealerweise in Technologien münden, die es Patienten ermöglichen, die Auswirkung ihres Lebensstils auf ihre Gesundheit, den Erfolg einer medizinischen Behandlung oder den Zustand ihres Implantats selbst zu überwachen und bei Bedarf z.B. über *eHealth* Apps mit ihrem behandelnden Arzt zu kommunizieren.

AKTUELLE AKTIVITÄTEN UND MITTELFRISTIGE ZIELE IN DER POF IV

Bio-Material Wechselwirkungen

Die Biomaterialforschung erfordert **eine integrative, skalenübergreifende Analyse der Struktur und Wechselwirkung von organischer und anorganischer Materie** sowie das fundamentale Verständnis biologischer Prozesse, die bestimmten Krankheitsbildern zu Grunde liegen. Hierfür werden moderne Verfahren der Strukturanalytik und Bildgebung entwickelt und eingesetzt.

Neben röntgen- und rastersonden-basierten Methoden, Bildgebung und computer-gestützten Verfahren, werden Cryo-EM und NMR-Spektroskopie mit Röntgen- und Neutronenstreuung kombiniert. Biologische Materialstrukturen (z.B. Amyloidfibrillen in Alzheimer und Diabetes), und die Selbstassemblierung makroskopischer Strukturen werden *in vitro* und *ex vivo* (in zellulärer Umgebung) untersucht. Mit hochempfindlichen optischen Verfahren können schwache und transiente Bio-Material Wechselwirkungen analysiert werden, die (z.B. als „*soft protein corona*“) das Verhalten von Nanopartikeln *in vivo* beeinflussen. Supercomputer ermöglichen die

Analyse von experimenteller Information durch KI-basierte Methoden und multiskalige Gewebesimulationen (z.B. Tumorgewebe oder Geweberegeneration).

Mit Hilfe von Hochdurchsatz-Synthese- und Charakterisierungsverfahren, und unterstützt durch KI Algorithmen, werden Datenbanken zu polymeren Biomaterialien aufgebaut. Die Entwicklung von Sensorik, die es ermöglicht, mit minimalen Probenvolumina oder *in vivo* zu arbeiten, ist eine große Herausforderung aber von essentieller Bedeutung, da meist nur wenig biologisches Material zur Analyse zur Verfügung steht. Oberflächenmodifikationen von Materialien sollen die Wechselwirkung mit Proteinen und anderen Biomolekülen optimieren oder das *in vivo*-Verhalten neuer Materialien oder physiologische Änderungen im Körper mittels implantierbarer Sensorik verfolgen.

Intelligente Träger- und Freisetzungssysteme

Ein zentrales Problem bei der Entwicklung neuer Medikamente ist ihr **Transport an den Wirkort über verschiedene biologische Barrieren** des Körpers. Hierzu liefert vor allem auch die Nanotechnologie wichtige Impulse („*Nanomedizin*“). Bakteriomimetische und bakteriogene Nanocarrier werden erforscht, um Infektionserkrankungen wirksamer zu bekämpfen. Die Penetration von Nanopartikeln in Haarfollikeln ermöglicht eine nicht-invasive Immunisierung. Aerosolisierbare Nanocarrier, neuartige Depositionssysteme und pharmakokinetische Modelle für die pulmonale Wirkstoffapplikation werden untersucht. Anorganische Nanocarrier oder die Verkapselung von Zytostatika sind wichtige Ansätze für die Therapie von Infektions- und Tumorerkrankungen. DNA Origamis, Nanocarrier, sowie bioresponsive Polymere, die auch in ein Implantat integriert sein können, eröffnen Zugang zu wirksamen und sicheren Therapien. Selbstassemblierende Nanopartikel werden zur theranostischen Überwachung mittels optoakustischer und multiskalare Bildgebung entwickelt.

Regenerative Therapien und *in vitro*-Testsysteme

Humane pluripotente Stammzellen sind Ausgangsmaterial für die Entwicklung und Herstellung von Zellen für die **3D-Gewebereparatur**, von **Organoiden** für die Modellierung von Krankheiten, oder von ganzen **Organen für die Zellersatztherapie**. Dabei sind im Besonderen die bereits entwickelten Organoidsysteme für Gehirn, Herz, Lunge, Bauchspeicheldrüse, und den Darm hervorzuheben. Die Integration eines fortschrittlichen Materialdesigns ist der Schlüssel zur Verbesserung von „*Tissue Engineering*“ für Diabe-

tes und Atemwegserkrankungen, Herz-Kreislauf und Neuromuskuläre Erkrankungen, sowie Infektionserkrankungen im Kernbereich der Helmholtz Gesundheitszentren. Durch Miniaturisierung und Parallelisierung lassen sich 2D- und 3D-Zellkulturen mit neuen Omics-Werkzeugen kostengünstig charakterisieren. Hier werden in Biochips („*organ-on-chip*“) Ansätze wie Langerhans-Insel-, oder Lungenepithelgewebe im Mikrometer Maßstab auf Chips gezüchtet und analysiert. Definierte Gewebestrukturen werden an Hydrogelgerüsten aus synthetischen und natürlichen Polymeren durch additive Herstellungsverfahren wie 3D-Druck aufgebaut. Dabei kommen Druckverfahren basierend auf Einzel-/Multiphoton oder Digital-Licht-Projektion Stereolithographie zur Verarbeitung von synthetischen Polymeren, Metallen und lebenden Zellen zum Einsatz, wobei insbesondere Beschichtungen von hochpräzisen, nm-skalierten Polymerstrukturen (*Nanoscribe*) mit biokompatiblen Materialien erforscht werden, um eine optimale Lichtausbeute und strukturelle Auflösung zu erreichen.

Weiterhin wird an humanen Zellkulturmodellen biologischer Barrieren (Darm, Lunge, Haut) geforscht, insbesondere im pathophysiologisch veränderten Zustand, z.B. bei der chronischen Infektion durch Biofilmbildende Bakterien. Klinische Studien zu Erstanwendungen von Prüfprodukten basierend auf Materialien, die Regenerationsprozesse modulieren können, werden durchgeführt. Translation in die klinische Anwendung erfolgt über eine Methodenplattform am BCRT. Diese umfasst das Design, die Fertigung und biologische Testung von Prüfprodukten und die Durchführung klinischer Studien zur Erstanwendung beim Menschen.

Multifunktionale Implantate

Implantate aus bio-responsiven Polymeren reagieren auf physiologische (pH, ROS Konzentration, u.a.) wie auch exogene Stimuli (Ultraschall, Magnetfeld). Dies ermöglicht „*on-demand degradation*“ von nur temporär benötigten Implantaten. Durch die kontrollierte Beweglichkeit von Implantaten ergeben sich Visionen wie „*Soft Robots*“ und Kontinuumsroboter, die sich, angetrieben von künstliche Muskeln („*shape memory polymer*“ Aktuatoren), oder flexiblen Materialien autonom in der Umwelt, und bei entsprechender Miniaturisierung auch im menschlichen Körper, fortbewegen können.

Abbaubare metallische Biomaterialien z.B. aus Magnesium bieten großes Potential, wenn sie sich anwendungs- und patientenspezifisch auflösen. Im Idealfall

triggern die freigesetzten Ionen die Geweberegeneration, die wiederum die Abbaugeschwindigkeit beeinflusst. Diese Art der physiologischen Rückkopplung ist einzigartig und eröffnet neue Möglichkeiten z.B. für die lokale Behandlung von Krebs. Werden optimierte Beschichtungen oder adaptive, bioinstruktive Eigenschaften einbezogen, können weitere Funktionalitäten implementiert werden: Steuerung der antimikrobiellen Eigenschaften von Implantatoberflächen oder Biofilm-Diagnostik an Explantaten. Kombinatorische (bioorganische) Chemie wird zur Identifikation neuer (z.B. MOF-basierter) Materialsysteme genutzt. Digitale Produktionstechnologien für die Herstellung multifunktionaler Implantate werden am HZG entwickelt. Wesentliche Erkenntnisse zum *in vivo* Verhalten neuer Materialien oder physiologische Änderungen im Körper werden von implantierbarer Sensorik geliefert.

LANGFRISTIGE STRATEGISCHE ZIELE

Die informationsgeleitete Entwicklung innovativer Materialien und Systeme für die Gesundheit und Lebensqualität birgt einzigartige Perspektiven **für Innovationen in der Erforschung von Krankheitsmechanismen, Diagnostik, Therapie und Prävention**. Dabei werden natur- und ingenieurwissenschaftliche Methoden mit medizinisch-pharmazeutischer Forschung verknüpft. Für die Konkurrenzfähigkeit auf Weltspitzen-Niveau ist eine **beschleunigte Digitalisierung**, insbesondere unter Verwendung von **künstlicher Intelligenz (KI)** eine notwendige Voraussetzung. Die Komplexität der biologischen Umgebung erfordert über ein grundlegendes Verständnis der Wechselwirkung von Material und Gewebe, um **individuelle Materialien für eine Biologisierung** zu entwickeln.

Bio-Material Wechselwirkungen

Für die Entwicklung und Optimierung bioinstruktiver Materialsysteme ist ein detailliertes Verständnis der Mechanismen an biotisch/abiotischen Grenzflächen erforderlich:

- Molekulares Verständnis der Bio-Material Grenzflächen-Wechselwirkung
- Integrative Strukturanalytik *in vitro* und *in situ* (z.B. Cryo-EM, NMR, fluidAFM, optische, akustische und röntgen-basierte Verfahren) und mehrkanalige Umgebung für molekulare Aktuierung (z.B. optogenetische, elektromagnetische Stimulation).
- Design und Synthese multifunktionaler Biomaterialien

Intelligente Träger- und Freisetzungssysteme

Um Arzneistoffe (therapeutische Proteine, Gentherapeutika, kleine Moleküle) und Kontrastmittel für die Diagnostik gezielt an ihren Wirkort zu bringen und kontrolliert freizusetzen, werden optimierte Materialien als Transportsysteme („*Advanced Delivery Systems*“) entwickelt.

- Biomimetische und biogene Nano-Carrier für den verbesserten und gerichteten Transport sowie exo- oder endogen kontrollierten Freisetzung von Wirkstoffen oder genetischer Information, für Erkrankungs- und Patientenspezifische Ansätze
- Selbstassemblierende Nanostrukturen für diagnostische & theranostische Anwendungen

Regenerative Therapien und *in vitro*-Testsysteme

Für die Modulation von Regenerationsprozessen, den Aufbau künstlicher Gewebe für *in vitro*-Testsysteme und künstlicher Organe für die Transplantationsmedizin bedarf es biofunktionaler Materialien und entsprechende Verarbeitungstechnologien.

- Bio-funktionale Materialien für die Herstellung von komplexen Gewebestrukturen mit heterogenen Zelltypen, (i) um menschliche Physiologie und komplexe Krankheitsmechanismen zu erforschen, (ii) zur Modulation von Regenerationsprozessen und Immunhomöostase, und (iii) für den Organersatz.
- Additive Fertigungstechnologien zum Aufbau komplexer Gewebestrukturen sowie Plattformen zum Kultivieren von physiologischen Geweben im Mikro- bis Makromaßstab (*“Organ-on-Chip”*, Organoide, Organe) für die Wirkstofftestung. Reduktion von Tierversuchen.

Multifunktionale Implantate

Implantate sollen Geweberegeneration stimulieren, minimal-invasiv anwendbar sein, und dem Patienten weitestgehend uneingeschränkte Mobilität und Aktivität garantieren.

- Betrachtung des gesamten Lebenszyklus von Implantaten und Wirkstoff-Transportsysteme mit adaptiven, sensorischen und aktuatorische Funktionen, insbesondere mittels „*dynamischer digitaler Zwillinge*“
- Automatisierte, Roboter- und KI-gestützte Design- und Herstellungsabläufe.

WESENTLICHE ZUKÜNFTIGE AKTIVITÄTEN

Bio-Material Wechselwirkungen

- Entwicklung und Anwendung von **integrativer Analytik** (Cryo-EM, NMR-Spektroskopie, AI/ML-unterstützte optische Bildgebung und molekulare Manipulation) zur Untersuchung der molekularen Eigenschaften von Nanopartikeln (Lipidvesikel, Nanofibrillen, selbst-assemblierenden Protein-Nanokompartimenten, Bio-Materialgrenzflächen).
- **Computergestützte Verfahren und KI** zum Verständnis und für die Optimierung der Materialien und Bio-Material Grenzflächen.
- **Multiparametrische Analyse** von dünnen Filmen und 2D- / 3D-Materialien zum mechanistischen Verständnis des Auf-, Um- und Abbauverhaltens.

Intelligente Trägersysteme

- Neue Technologien und Modelle für den Transport antimikrobieller Wirkstoffe (einschließlich Nukleotide) über die Gram-negative Bakterienzellwand (HIPS).
- Selbstassemblierende Nanocarrier sowie Nanokompartimente, die in lebenden menschlichen Zellen erzeugt werden, für den gerichteten Transport von Wirkstoffen und Diagnostika in Zellen und Organe (HZG, HIPS, HMGU).

Regenerative Therapien und *in vitro*-Testsysteme

- Neue Materialien, auch mit programmierbarer Zell- und Gewebeinstruktivität, für zukünftige Anwendungen am Patienten, die es erlauben funktionale Nanokompartimente aus menschlichen Zellen, Gewebe, Organoide und Organe (Pankreas, Leber, Retina, Herzgewebe) in einem für die Transplantation relevanten Maßstab zu generieren (HMGU, MDC, HZG).
- Hochskalierung der Produktion von spezifischen Zelltypen und Entwicklung von 3D-/Bio-Druckverfahren für die **Herstellung von komplexen, kontrollierbaren, funktionalen Gewebegerüsten und biologischen Strukturen**.
- Entwicklung von Barriere-Modellen und Bio-Chips mit biophysikalischen Schnittstellen und Tinten aus synthetischen und natürlichen Biopolymeren (HMGU, KIT, HIPS, MDC).

Multifunktionale Implantate

- Steuerbare Implantate und Wirkstofffreisetzungssysteme durch Implementierung von Sensorik und Aktuatorik. Intrinsische Signale werden von Implantaten erfasst und bewirken die Adaption des Materials an seine Umgebung, z.B. Struktur, Abbauverhalten, Freisetzungskinetiken (HZG, KIT).
- Implementierung von computer-/robotergestützter, automatisierter Herstellung und 3D-Druck zur Integration von Materialfunktionen in Implantate und andere Medizinprodukte.
- Beschleunigung der Translation durch Adressieren von Engpässen in der Entwicklungskette: integrierte Prozesse, Herstellung und Charakterisierung von Prüfprodukten.
- Vorhersage von optimalen Implantatmaterialien durch multiphysikalische und skalenübergreifende Simulation sowie durch KI Ansätze („*digitaler Zwilling*“).

INFRASTRUKTURNUTZUNG

Die spezifischen Herausforderungen der Materialforschung in der Gesundheitsforschung erfordern einen Multimethodenansatz. Hierzu sind die hochentwickelten Infrastrukturen der Helmholtz Gemeinschaft essentiell und sollen weiterentwickelt werden. Zentral sind insbesondere **röntgen- und neutronenbasierte Verfahren, *in situ*-Mikroskopie, multiskalare Bildgebung, Kryo-Elektronenmikroskopie, Ultrahochfeld NMR-Spektroskopie, Hochdurchsatzsynthese und Charakterisierung** sowie **Supercomputing**.

SYNERGIEN

Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler verschiedener Helmholtz-Zentren arbeiten bereits in multidisziplinären Konsortien zur Entwicklung neuer Materialien in der Gesundheitsforschung auf nationaler (BMBF) oder europäischer Ebene (**IMI, Marie Curie, ITNs**) zusammen. Die Synergie zwischen Material- und Gesundheitsforschung soll in Zukunft verstärkt werden durch (i) Interdisziplinäre Workshops oder Hackathons und (ii) die Einrichtung einer Zentren- und Forschungsbereich übergreifenden Graduiertenschule „*Materialforschung für die Gesundheit*“.

WISSENSTRANSFER MIT METHODEN-PLATTFORMEN

Die hier vorgestellten Arbeiten können stark von den beiden fokus-übergreifenden Methodenplattformen profitieren. Neben der Nutzung der exzellenten Charakterisierungsmöglichkeiten, die in der Plattform „*Korrelative Multimethoden Materialsysteme*“ gebündelt sind, erlaubt der Austausch mit der Methoden-Plattform „*Beschleunigte Materialentwicklung*“ die *Digitalisierung* der Biomaterialentwicklung. Die abbaubaren metallischen Implantate aus Magnesium sind eines der Leuchtturmprojekte, die in der Methoden-Plattform „*Beschleunigte Materialentwicklung*“ im Rahmen des JL VMD (FB Information) und des JL MDMC (Bestandteil der Plattform „*Korrelative Multimethoden Materialsysteme*“) bearbeitet werden. Zu diesen Aktivitäten trägt auch das Programm („*Materials Systems Engineering*“) mit mehreren Topics (u.a. Arbeiten zur Charakterisierung von Abbauprodukten polymerer Implantatmaterialien) bei.

Ziel: Biofunktionale Materialien für Gesundheitsforschung und Medizin

Beteiligte FB: Gesundheit, Information

Beteiligte Zentren: HMGU, HZI-HIPS, MDC, DKFZ, HZG, KIT, FZJ

Infrastrukturen: MLZ, JSC, ER-C, KNMF, GEMS, BNMRZ, BMT, BCRT, PETRA III

SCHWERPUNKTTHEMA „BIOBASIERTE- UND -INSPIRIERTE MATERIALIEN IN DER BIOÖKONOMIE“

KURZBESCHREIBUNG

Bio-basierte und bio-inspirierte Materialien bergen große Chancen als nachhaltige Alternativen für Materialien aus fossilen Rohstoffen. Dabei ist aber alleine die Ableitung aus biologischen Rohstoffen nicht hinreichend; vielmehr muss auch für diese Materialien (1) die nachhaltige Nutzung durch adäquates Design und die gezielte Einführung in Kreisläufe mit möglichst geringen negativen Effekten auf natürliche Systeme erreicht werden, (2) der praktische Einsatz durch wettbewerbsfähige Preise ermöglicht werden und (3) die Funktionalität der Stoffe mindestens so gut sein, wie die von Konkurrenzmaterialien aus fossilen Rohstoffen. Gleichzeitig bietet die Natur aber auch (4) strukturelle und funktionelle Vorbilder, die als bio-based design neue Anwendungen ermöglichen. (5) Darüber hinaus hat die Bioökonomie einen hohen Bedarf an spezifischer Materialentwicklung. Hierzu gehören z.B. Katalysatoren zur Umsetzung von Biomasse in Bioraffinerien oder Membranmaterialien zur Trennung von komplexen Mischungen bio-organischer Flüssigkeiten oder Gase. Bioökonomie besitzt demnach Komponenten, in denen biologische Materialien umgesetzt, diese als Inspiration für Strukturen oder Funktionen von Materialien genutzt werden, aber auch einen Bedarf an neuen Materialien zur Umsetzung bioökonomischer Prozesse. Alle Ansätze müssen dabei die Grundsätze von *Nachhaltigkeit* und Umweltrelevanz einhalten.

AKTUELLE AKTIVITÄTEN UND MITTELFRISTIGE ZIELE IN DER POF IV

Die Bioökonomie-Forschung der Helmholtz-Gemeinschaft hat eine lange Tradition in Themen der Effizienz der Herstellung von Biomasse in Pflanzen und deren Umwandlung durch Mikroorganismen /Topic 7). Dabei steht bislang neben der Produktion für Nahrungsmittel vor allem die Nutzung als Rohstoff in der chemischen Industrie im Vordergrund. Die **integrierte Betrachtung von Biomasseproduktion, deren Umwandlung in Bioraffinerien oder in biotechnologischen Prozessen** (parallel zur Nutzung von organischen Reststoffströmen) zu modifizierten Rohstoffen oder Chemikalien und die **Entwicklung von Stoffkreisläufen** ist ein wesentliches Konzept nachhaltiger Bioökonomie. Bio-basierte Materialien werden dabei entweder aus den (Plattform-)Chemikalien wiederaufgebaut oder aus teilmodifizierter Biomasse, wie z.B. bei der Nutzung von Fasern, Chitin oder Lignin aufgebaut. Kaskadennutzung in diesem Sinn verwendet z.B. in Baustoffen zunächst

die gewachsene biologische Struktur des Holzes, zerlegt dann die Struktur in Chips oder Fasern, nutzt dann chemische Monomere und führt dann erst im letzten Schritt bei der energetischen Nutzung die Umsetzung in CO₂ durch. Zielsystem sind auch Biopolymere, die entweder als Drop-in-Produkte fossile Rohstoffe ersetzen, aber auch neue Polymersysteme, die in besonderer Art und Weise Recycling von Materialien erlauben. Forschungsarbeiten im Forschungsbereich Erde und Umwelt, die diesem Forschungsthema zuarbeiten, sind im Topic 7 Bioökonomie zusammengefasst.

Neben der klassischen Nutzung von Biomasse und dem Einsatz der gewachsenen Strukturen werden zunehmend wertgebende Materialeigenschaften als bio-basierte Beschichtungs- oder Funktionalisierungsmaterialien erforscht. So werden beispielsweise mit der Ionenstrahltechnologie Polymer Nanokanäle hergestellt und anschließend biochemisch modifiziert, um die Funktionalität von Protein-Biokanälen nachzubilden (GSI). Es werden auch Systeme entwickelt, bei denen reaktive oder bei bestimmten Reizen Substanzen freisetzende Oberflächen aufgebaut werden. Dabei werden Strukturen und Funktionen von Pflanzen (FZJ) und marinen Organismen (AWI) analysiert, um **neue bio-inspirierte Ansätze** für die Entwicklung strukturell optimierter technischer Strukturen und Materialien zu entwickeln. Hierbei werden biophysikalische Prinzipien von biologischen Verbundsystemen analysiert und daraus abgeleitete Prinzipien durch generative Entwurfssoftware angewandt um (a) ressourceneffiziente multifunktionale Leichtbaustrukturen, die auf Robustheit, Permeabilität und Schwingungseigenschaften optimiert sind, zu entwickeln, (b) um Nanokomposite in komplexen Leichtgewichtsgeometrien und Materialsubstitution (z.B. biologisch abbaubare Kunststoffe) aufzubauen und (c) die Entwicklung morphogenetischer Algorithmen für eine nachhaltige Produktentwicklung abzuleiten.

LANGFRISTIGE STRATEGISCHE ZIELE

- Erweiterung des Portfolios der Helmholtz-Bioökonomie-Forschung zu bio-basierten Materialien um relevante Anwendungsbeispiele.
- Intensivierung der Zusammenarbeit der Bioökonomie-Forschung mit Forschung und Infrastrukturen der Materialforschung in der Helmholtz-Gemeinschaft.
- Demonstration von **Kaskadennutzung von Biomasse** mit einem bedeutenden Anteil der Rohmaterialnutzung.
- Etablierung um Umsetzung von strukturellen und funktionellen Designansätzen auf Basis bio-inspirierter Materialien.
- Anwendung von Lebenszyklus-Analyse und Bewertung der *Nachhaltigkeit* von (bio-basierten) Materialsystemen in der Interaktion mit der Umwelt.
- Demonstration der von bio-basierten Materialien für nachhaltige Nutzung.
- Integration der Forschung an bio-basierten Materialien in die Materialforschungsaktivitäten der Helmholtz-Gemeinschaft.
- Etablierung der **Analyse von Umweltwirkungen von Rohstoffgewinnung**, Herstellung und Nutzung von neuen Materialien parallel zu Materialentwicklungen in anderen Bereichen der Materialforschungsstrategie.

WESENTLICHE ZUKÜNFTIGE AKTIVITÄTEN

- **Kaskadennutzung von bio-basierten Materialien und Rohstoffen**

In einer Kreislaufwirtschaft müssen innovative Bio-raffineriekonzepte die Biomassennutzung für die Nahrungs- und Futtermittelproduktion mit Wertschöpfungsketten für die stoffliche und Material-Nutzung unter Nutzung erneuerbarer Energien integrieren. Dies umfasst die Herstellung und Veredelung von chemischen Bausteinen für die stoffliche und energetische Nutzung (kaskadierte Biomassennutzung und Polygeneration). In solchen fortschrittlichen Bioraffinerien werden Biomassenebenprodukte und organische Rückstände oder Abfallströme aus Land- und Forstwirtschaft, Aquakultur, Lebensmittelindustrie, kommunalem Bioabfall etc. zu Zwischen- oder Endprodukten für die Bereitstellung von Massenchemikalien, Plattformchemikalien und Energieträgern verwertet werden, wodurch Nährstoffkreisläufe geschlossen und fossile Ressourcen substituiert werden.

- **Bionische Lösungen für Materialdesign**

Die Analyse von Strukturen und Funktionen von Pflanzen und marinen Organismen kann auch genutzt werden, um neue bio-inspirierte Ansätze für die Entwicklung strukturell optimierter technischer Strukturen zu etablieren. Natürliche Strukturen und Funktionen werden analysiert und auf nachhaltige, auch biobasierte Materialien wie Bagasse, Zellulose und abbaubare Kunststoffe angewendet. Dazu gehören (a) Anwendungspfade für ressourceneffiziente, auf Robustheit, Permeabilität und Schwingungseigenschaften optimierte multifunktionale Leichtbaustrukturen, (b) Nanokomposite in komplexen Leichtbaustrukturen und Materialsubstitution (z.B. biologisch abbaubare Kunststoffe) und (c) die Anwendung der dynamischen Entwicklung von Strukturen (z.B. Morphogenese komplexer biogener Leichtbaustrukturen) zum Verständnis biophysikalischer Prinzipien und deren Übertragung auf Algorithmen für generative Designsoftware. Ziel ist auch die weitere Umsetzung der Technologien für die Anwendung in der weiteren Bioökonomie.

Product Design



Abb. 10: ELISE steht für das Konzept des AWI über „*Evolutionary Light Structure Engineering*“. Bauprinzipien der extrem leichten, aber mechanisch stabilen Schalen der Radiolarien und Kieselalgen (Diatomeen) systematisch auf technische Bauteile zu übertragen. Durch den integrativen Software Ansatz wurde eine leistungsstarke, universell einsetzbare Entwicklungssoftware für alle Branchen – vom Schiffbau bis zur Luft- und Raumfahrttechnik entwickelt. Hier sind Synergien mit dem Schwerpunktthema „*Leichtbau*“ vorhanden (Quelle: AWI).

- **Chemo- und Bio-Katalysatoren und Beschichtungen mit und von Biomaterialien**

Neben intensiven Arbeiten zu Biokatalysatoren werden auch innovative Erweiterungen klassischer biotechnologischer Umwandlungsprozesse verfolgt, in denen hybride bio-/chemisch-katalytische Prozesse umgesetzt werden, die auf Kombinationen von Ganzzell-Biokatalysatoren, Enzymen und Chemo-Katalysatoren basieren und mit neuartiger (Bio-)Reaktortechnologie integriert werden, einschließlich z.B. strömungsschemischer Systeme und bioelektrochemischer Reaktorsysteme. Solche Hybridprozesse bieten neue Möglichkeiten der Herstellung und fördern die Verknüpfung von biologischer und chemischer Katalyse. Um mehrstufige Prozesse dieser Komplexität zu stabilisieren und zu optimieren, werden rechnergestützte Konstruktion und integrierte Verfahrenstechnik entscheidend sein. Diese große Herausforderung kann derzeit nur in gut ausgestatteten Instituten mit multidisziplinären Forschungsteams bewältigt werden und bietet hervorragende Möglichkeiten zu Synergien mit anderen Bereichen der Materialforschung.

- **Trennmembranen für bioökonomische und biomedizinische Anwendungen im Umweltschutz**

Stofftrennungen sind nicht nur essenziell für biologische Organismen, sondern ein wichtiger Baustein in vielen Prozessketten und daher für eine nachhaltige Wirtschaft. Die Membrantechnologie ermöglicht die Verschaltung mit anderen Trennverfahren wie Destillation, Absorption oder Adsorption zu hybriden Prozessen, welche in ihrer Kombination energetische Optima erreichen lassen. Anwendungen wie die Umkehrosmose zur Wasserentsalzung oder die organophile Nanofiltration sind ihren Konkurrenztechnologien hinsichtlich Energieeinsatz überlegen. Die Barrierewirkung gegenüber Viren und Bakterien und die hohe Funktionalisierbarkeit von Ultra- und Mikrofiltrationsmembranen demonstrieren ebenfalls Einsatzpotenziale von Membranen, welche für andere Verfahren kaum gegeben sind. Beispiele für den Einsatz von Membranen wurden bereits in den Schwerpunktthemen „Materialien für Wasserstofftechnologie“ und „Batteriematerialien“ aufgeführt. Weitere Anwendungsbeispiele sind die Hämodialyse bei Niereninsuffizienz oder die Wasserentsalzung zur Bereitstellung von Trinkwasser, Separatormembranen für Batterien oder Brennstoffzellen. Weitere Anwendungsbereiche von Membranen sind die Aufreinigung von Chemikalien und Pharmazeutika oder die Anreicherung von gewünschten Ionen in Gewässern oder der Einsatz von Membranreaktoren zur Stoffumwandlung. Die Entwicklung von neuen Membranen

mit spezifischer Funktionalität erfordert eine große Bandbreite interdisziplinärer Forschung, die von der Synthese der Membranmaterialien (diese können anorganischer Natur sein oder aus Polymeren oder Kompositmaterialien bestehen) über die Membranherstellung und ggf. Funktionalisierung und deren Einbau in Module bis hin zum kompletten technischen Prozess führt. Ziel der Forschung ist es, eine bedarfsgerechte Membranentwicklung zu ermöglichen, bei der Experiment und modell-basierte Computersimulationen Hand in Hand gehen werden um die experimentelle Forschung besser optimieren zu können und für die Gesellschaft maßgeschneiderte Membrantechnologien für verschiedene Anwendungen bereitstellen zu können.

AUSGEWÄHLTE INFRASTRUKTURNUTZUNG

Der Anteil an material-bezogener Forschung im FB EuU ist bislang überschaubar. Eigene Infrastrukturen aus dem FB EuU, die für die eigenen Forschungsarbeiten benutzt, aber auch für die Kooperation mit anderen Materialwissenschaftlerinnen und -wissenschaftlern einsetzbar sind, umfassen

- **Beobachtungspattformen** in vielen relevanten Umweltkompartimenten, in denen auch die Umweltwirkung von Materialien erfasst werden kann,
- verschiedene **tomographische Systeme** (CT, MRI, PET), die aus makroskopischer Ebene Strukturanalysen von Pflanzen und Biomaterialien ermöglichen oder auch Mikroskopie-Anlagen und Technologien für biologische Materialien, und
- **IT-basierte Rekonstruktion** und **Bildanalyse-Verfahren** und Software zum bionischen Leichtbau (ELISE).

Interessant könnte für Forscher des FB EuU die Nutzung der high-end-Infrastrukturen sein. Hierzu gehören u.a.

- **Röntgen- und neutronenbasierte Verfahren** (Diffraktion, Tomographie, Kleinwinkelstreuung, Spektroskopie (**PETRA III, DESY, BESSY II, HZG, FZJ**)) zur Charakterisierung von Biomaterialien,
- **hochenergetische Ionenbestrahlung** für die Herstellung von Ionenspurnmembranen mit maßgeschneiderten Parametern (GSI),
- **in situ-Mikroskopie, Bildgebung und Kryo-Elektronenmikroskopie** (FZJ, HMGU), und das
- Jülich **Supercomputing Center** (FZJ)

SYNERGIEN

Beiträge aus dem FB EuU zur Materialforschung können wichtige Elemente für die gesamte Materialforschungs-Strategie der HGF in PoF IV leisten. Dies ist derzeit noch ein recht kleines Feld im Programm; bietet aber sehr interessante Ansätze – insbesondere in der Kooperation mit Experten der Materialforschung in der HGF.

- Beobachtungsplattformen des FB EuU können wichtige Hinweise auf die Persistenz und die Verbreitung von Materialien in relevanten Umweltkompartimenten des Erdsystems geben.
- Bio-basierte Materialien und Kaskadennutzung mit sukzessiver Zerlegung von Biomasse können interessante Ansatzpunkt für konzeptionelle (z.B. Kreislaufwirtschaft) Untersuchungen als auch für alternative Materialien (C-basiert) sein.
- Biologische Prinzipien, die im FB EuU analysiert werden, können interessante Impulse bzgl. Strukturen, Funktionen und alternativen Rohstoffen in die Materialforschung geben.

WISSENSTRANSFER MIT METHODEN-PLATTFORMEN

Mit der Methoden-Plattform „*Beschleunigte Materialentwicklung*“ ergeben sich Möglichkeiten zur verbesserten Charakterisierung von bio-basierten Materialien über Robotik, nicht-invasive Verfahren und prädiktive Simulations-Ansätze.

Ziel: Entwicklung bio-basierter Materialien und von Materialsystemen, die zur Reduzierung von Umwelt- und Klimabelastungen beitragen

Beteiligte FB: Erde und Umwelt, Materie, Energie und Gesundheit

Beteiligte Zentren: AWI, HZB, HZG, FZJ, KIT, HMGU, GSI

Infrastrukturen: Pflanzen-MRI, Pflanzen-PET, Umweltmonitoring-Plattformen, UNILAC, CRYRING, PETRA III

SCHWERPUNKTTHEMA "MATERIALIEN FÜR LEICHTBAU"

KURZBESCHREIBUNG

Leichtbau-Materialien und Leichtbaustrukturen der Zukunft werden neben hohen spezifischen Festigkeiten und Steifigkeiten auch deutlich bessere thermische Eigenschaften, robuste Prozessierbarkeit, nachhaltige Nutzbarkeit über den Lebenszyklus, sowie Funktionen wie die Speicherung und Leitung von elektrischer Energie oder Selbstheilungspotential aufweisen müssen. Dazu wird neben dem Materialdesign zur Einstellung dieser mechanischen und funktionalen Eigenschaften ein reproduzierbares Prozessdesign in Kombination mit ökonomischer und ökologischer Fertigungstechnik entwickelt. Hier stehen neue Faserwerkstoffe, Matrixmaterialien, Leichtmetalllegierungen, deren Herstellungs- und Fügeprozesse inkl. 3D-/4D-Druck und multifunktionelle Beschichtungen im Fokus.

Solche Werkstoffsysteme müssen über alle Skalen entwickelt werden, damit sie die gewünschten Eigenschaften erreichen. Zudem müssen sie verarbeitet, integriert und in komplexen Systemumgebungen getestet werden. Die physikalischen Veränderungen der Werkstoffsysteme während der Nutzung müssen für eine zuverlässige Lebensdauervorhersage bestimmt werden. Dazu ist es nötig, größere Parameterfelder abzudecken, als es durch klassische experimentelle Ansätze heute möglich ist. Die Komplexität der skalenübergreifenden Material- und Prozessentwicklung soll durch Charakterisierungs- und Simulationstechniken und „digitalen Zwillingen“ beherrscht werden.

AKTUELLE AKTIVITÄTEN UND MITTELFRISTIGE ZIELE IN DER POF IV

Die Entwicklungsfelder für Leichtbaumaterialien sind weitgefasst. Für elektrische Antriebsaggregate sind Werkstoffe mit guter elektrischer Leitfähigkeit not-

wendig, die verlustminimal dem Energietransport oder der Speicherung und gleichzeitig der strukturellen Lastübertragung dienen können. Gleichzeitig erfordert das zusätzliche Batteriegewicht einen nochmals deutlich **verbesserten Fahrzeugleichtbau**. Auch auf dem Gebiet der Funktionswerkstoffe, die als Energiewandler z.B. mechanische Effekte mit elektrischen oder magnetischen Feldänderungen verbinden, sind ebenfalls neue Entwicklungen erforderlich. So müssen z.B. heutige bleihaltige Piezokeramiken mittelfristig durch bleifreie Funktionswerkstoffe ersetzt werden. Zusätzlich zu bleifreien Piezokeramiken, wie sie am DLR entwickelt werden, gibt es Ansätze für nanoporöse Metall-Polymer-Hybridmaterialien am HZG.

Die ganzheitliche Betrachtung der Entwicklungskette berücksichtigt auch das **Recycling und die CO₂-armen Herstellverfahren**. Auch die Prozesskette metallischer Werkstoffe von der Materialentstehung, über deren Prozessierung (z.B. innovatives Gießwalzen, Walzen, Strangpressen und Schmieden, additive Prozesse) bis zu ihrer Funktionalisierung müssen ganzheitlich entwickelt werden. Die Verbindung von metallurgischem Materialdesign und wissensbasiertem technologischem Prozessdesign während der thermomechanischen Behandlung führt zu einer Steigerung der Leistungsfähigkeit von neuen Leichtbaulegierungen.

Nachhaltiger Leichtbau kann in weiten Bereichen über echten 3D- oder 4D-Druck erreicht werden. Heutige in schichtweisem Aufbau erzeugte 3D-Strukturen werden künftig durch in den Raum freistehend gedruckte Strukturen ersetzt, wofür insbesondere schnell erstarrende Werkstoffe und ein zugehöriges Thermalmanagement entscheidend sind. Der Einsatz von Robotern adressiert die 4. Dimension (Zeit) des 3D-Drucks und verspricht erheblich höhere, für die Industrie interessante Ausbringungsraten. Der 3D-Druck von Metallen über verschiedene Verfahren (SLS, SLM, EBM, FFF, ...) lebt von

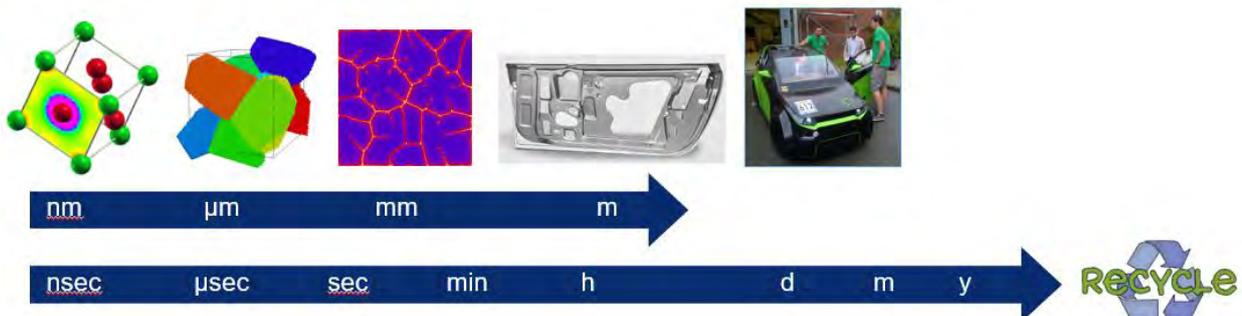


Abb. 11: Skalenübergreifende Beschreibung von Materialsystemen in Leichtbau (Quelle: HZG).

V. SCHWERPUNKTTHEMEN & PLATTFORMEN DER HELMHOLTZ-MATERIALFORSCHUNG

der Betrachtung der gesamten Prozesskette (KIT, DLR, HZG). Diese beginnt bei der für den 3D-Druck spezifischen Materialentwicklung, betrachtet die Prozessentwicklung und reicht bis hin zum spezifischen Design sowie die Modellierung komplexer Strukturen und deren funktionsbasierte Optimierung (DLR, KIT). Das HZG, KIT und DLR arbeiten hierzu an der Entwicklung von Pulvern, Feedstocks und kontinuierlichen Verfahren zur Herstellung von hochwertigem Basismaterial. Unterstützt wird die Prozessentwicklung durch geeignete Simulations- und Modellierungstools, um die Entwicklungszeiten signifikant zu verkürzen.

Für einen industriellen Einsatz neuer Werkstoffe sind auch die zugehörigen Fertigungsverfahren für die Bauteilherstellung parallel zu entwickeln. Bisher lassen sich im Leichtbau, besonders bei generativen Verfahren, durch die starke Abhängigkeit struktureller Kennwerte von den gewählten Fertigungs- und Fügeverfahren Leichtbaupotentiale nicht vollständig heben. Hier sind Ontologien zu entwickeln, die die mechanischen und künftig auch thermischen und elektrischen Kennwerte von hergestellten Bauteilen mit den Herstellungsbedingungen verknüpfen (DLR). Reibbasierte Fügeverfahren werden als Ersatz für konventionelle Niettechnologien auch für hybride Materialkombinationen entwickelt (HZG). Metallische Leichtbaustrukturen zeigen ein großes Potenzial zur Steigerung der Ermüdungsbeständigkeit über Eigenspannungsdesign. Das Laser-Shock-Peening bietet in der Kombination mit einem „*Digitalen Zwilling*“ in Form einer mehrschrittigen Prozesssimulation bis hin zur Rissausbreitungssimulation die Möglichkeit, ein Druckeigenspannungsfeld in das jewei-

lige Bauteil und Belastungsszenario maßgeschneidert einzuprägen (HZG).

Neue Faserkeramiken (DLR) oder TiAl-basierte Werkstoffe (HZG) eröffnen Leichtbaustrukturen für die Anwendung bei hohen Temperaturen, vor allem im Bereich der Luft- und Raumfahrtantrieben. Bei den Faserkeramiken stehen dabei neue SiC-SiC und oxidische Composites im Fokus. Die Kernherausforderung dabei sind thermische **stabile Fasern und oxidationsbeständige Faser-Matrixverbunde**, die höhere thermische Leistung und Lebensdauer aufweisen. Die Integration numerischer Modelle des Materialverhaltens mit den digitalen Modellen der Bauteile in „*digitalen Zwillingen*“ der Prüfeinrichtungen liefert Einblicke in das 4D-Verhalten des Materials auf allen Skalenebenen und erlaubt die Optimierung der Validierungsexperimente durch Rückkopplung mit den berechneten Materialreaktionen.

Leichtbauwerkstoffe und -strukturen können von Oberflächenbehandlungsverfahren stark profitieren. Dies ist besonders wichtig für die strukturellen Leichtmetalle wie Magnesium und Aluminium, die vor allem im Verbund mit anderen Strukturwerkstoffen oft unter Korrosionsproblemen leiden. Daher ist die Entwicklung multifunktionaler Oberflächen und neuer Strategien zur aktiven Steuerung von Degradationsprozessen bei Leichtmetallen und Multimaterialstrukturen eine Schlüsselaktivität zur Erweiterung des Anwendungsfeldes und Einsatzgebietes. Neuartige funktionelle Beschichtungen und Oberflächenbehandlungen auf der Basis eines aktiven Nanocontainers wie LDH, der in die Poren von PEO-Beschichtungen und die Kombination

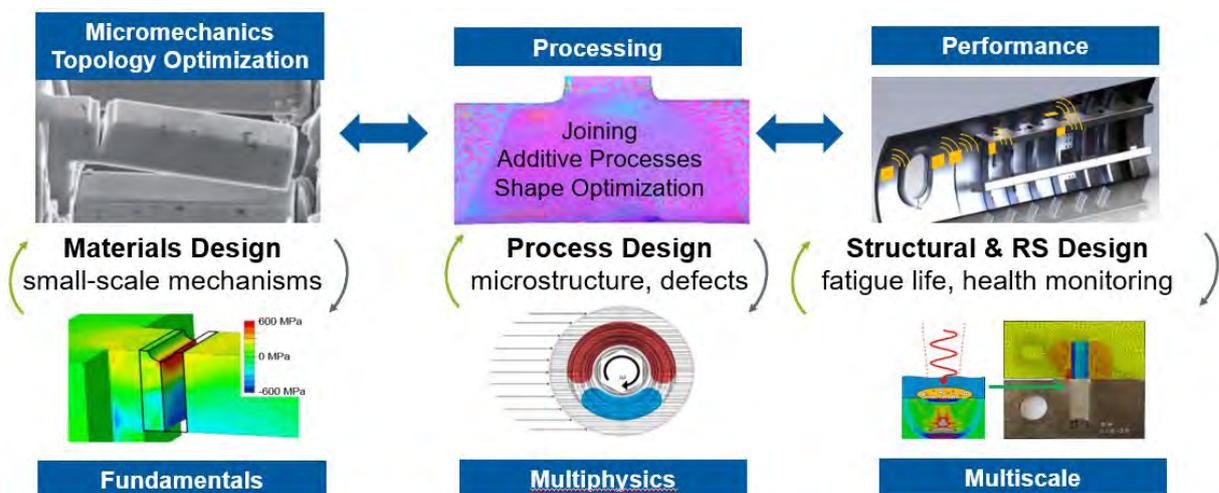


Abb. 12: Kopplung von Material, Prozess und Performance durch „*Digitale Zwillinge*“ (Quelle: HZG).

mit funktionalen Komponenten, die innerhalb von LDH-Strukturen eingekapselt werden, können eine bedarfsorientierte, getriggerte Abgabe gewährleisten. Diese responsiven, aktiven und funktionellen Nanocontainer, die auf Leichtmetallsubstraten und hybriden Multimaterialstrukturen abgeschieden werden, können als Werkzeugkasten verwendet werden, um ein flexibles, bedarfsorientiertes Design multifunktionaler Beschichtungen zu ermöglichen. Um solche Oberflächen zu konzipieren, ist ein neuer gekoppelter Modellierungsansatz erforderlich, der Aspekte der Metallurgie, Beschichtungs- und Prozesstechnologie, Physik und Elektrochemie unter Verwendung von Multiskalen-Simulationswerkzeugen und Ansätze des maschinellen Lernens berücksichtigt.

LANGFRISTIGE STRATEGISCHE ZIELE

- **Polymere Faserverbundwerkstoffe (PMC):** Fasern mit hoher thermischer und elektrischer Leitfähigkeit (z.B. Pechbasis) sind verfügbar und erweitern das Einsatzspektrum von PMCs. Neue **Hochleistungsfasern** (z.B. CNT-Basis) und **neue Hybride** mit erhöhter mechanischer, thermischer und elektrischer Leistung erweitern den Anwendungsbereich von PMCs.
- **Keramische Faserverbundwerkstoffe (CMC):** Neue oxidationsgeschützte und lebensdaueroptimierte **SiC-Faser verstärkte SiC-Keramiken** stehen für Anwendungen bei Temperaturen über 1200°C zur Verfügung. Neue oxidische Keramikfasern eröffnen den oxidischen CMC Anwendungstemperaturen über 1000°C. Multiphysikalische, mehrskalige Verfahren zur Berechnung der Eigenschaften, Versagensmechanismen und der Lebensdauer erlauben eine präzisere Auslegung von CMC-Komponenten.
- **Leichtmetalllegierungen:** ein prädiktives virtuelles Material- und Prozessdesign auf der Basis von „*digitalen Zwillingen*“ erlaubt ein deutlich verbessertes virtuelles Materialdesign. Durch gezieltes Mikrostrukturdesign lassen sich damit Legierungen entwickeln, die maßgeschneiderte anwendungsspezifische Eigenschaftsprofile aufweisen, und die in einer kontinuierlichen Prozesskette einschließlich Recyclings kontrolliert und robust hergestellt werden können.
- **Neue Funktionswerkstoffe:** bleifreie Piezokeramiken, nanoporöse Metall/Polymer-Hybridmaterialien, energiespeichernde Leichtbaustrukturen, Mg-basierte Leichtbauwerkstoffe mit erweiterter Funktionalität inklusive einem Wieder- oder Weiterverwendungskonzept für den Werkstoff oder die daraus hergestellten Strukturen, stehen zur Verfügung.

- **Additive Verfahren:** Ontologien für wesentliche mechanische Kennwerte von Bauteilen aus generativ gefertigten Werkstoffen in Zusammenwirken mit Herstellprozessen von Leichtbaustrukturen stehen allgemein nutzbar zur Verfügung. Polymere 3D-Drucker für faserverstärkte Kunststoffverbunde, die nicht mehr schichtweise, sondern direkt in die dritte Raumrichtung drucken, erweitern die Einsatzmöglichkeiten. Für den 3D-Druck entwickelte Legierungen ohne Textur- und Gefügenachteile erweitern den Nutzungsbereich des 3D-Drucks für Hochleistungsstrukturen. Eine physisch und digital integrierte Prozesskette ist verfügbar. Die prädiktive Modellierung der Ermüdung von Materialien in definierten Umgebungen inklusive des Eigenspannungsdesigns auf der Basis eines „*digitalen Zwillinges*“ ist verfügbar.
- Die Anwendung von *ab initio*-Methoden erlauben die präzise Entwicklung von Mehrlagen-Schutz- und Funktionsschichten für Leichtmetalle, Hybridwerkstoffe und Faserkeramiken. Im Fokus stehen Oxidationsschutz, Korrosionsschutz und funktionale Oberflächen.

WESENTLICHE ZUKÜNFTIGE AKTIVITÄTEN

Die hier betrachteten Prozessketten umfassen die Herstellung von Halbzeugen aber auch struktur- und funktionsoptimierte Bauteile und deren Weiterverarbeitung zu Leichtbau-Komponenten. Die Systematik und Methodik wird am Beispiel von Magnesiumknetlegierungen entwickelt und wird auf weitere Leichtbaumaterialien übertragen, die auch bezüglich der *Nachhaltigkeit* und Klimaneutralität bewertet werden. Die einzigartige Infrastruktur zur Halbzeugherstellung am HZG stellt einen semiindustriellen Maßstab dar, der einen Transfer in die industrielle Anwendung sicherstellt. First principles-Methoden sollen die Vorhersage der auftretenden Phasen in multikomponentigen Leichtmetall-Systemen erlauben, um durch ein virtuelles Screening großer Zusammensetzungsräume vielversprechende Materialzusammensetzungen zu identifizieren. Vorgehensweisen, wie sie schon jetzt z.B. beim virtuellen Screening von Molekülen in der Chemie in Anwendung sind, würden damit auf das methodisch anspruchsvollere (erhöhte Temperaturen) und rechenaufwändigere Gebiet der multi-komponentigen Leichtmetall-Legierungen übertragen. In weiterführenden Arbeiten sollen so design- und funktionsoptimierte Leichtbauteile mit Hilfe neuartiger Materialkombinationen von Metall/Keramik (z.B. unter Verwendung von Metall- bzw. Keramikfasern) in Kombination mit u.a. generativer Fertigung realisiert werden. Durch geeignete Modellierungs- und Simulationstools soll der experimentelle Aufwand sowohl

bei der Material- als auch bei der Prozessentwicklung deutlich reduziert werden. **Die Kombination von bio-nischen und funktionellen Oberflächen, unter Betrachtung der Wechselwirkung mit der Umgebung, wird zu einer deutlichen Leistungssteigerung, längerer Lebensdauer und somit verbesserter Nachhaltigkeit führen.**

AUSGEWÄHLTE INFRASTRUKTURNUTZUNG

- **3D-Druckersysteme** für metallische, keramische und polymere Werkstoffe erlauben eine schnelle Herstellung von neuen Werkstoffen und die Umsetzung in testbare Komponenten.
- Robotergestützte **mechanische Testanlagen und hochauflösende chemisch-physikalische Analysesysteme mit Schnittstellen zu digitalen Datenmanagementsystemen und KI-basierten Analysetools** erlauben die schnelle Materialbewertung
- Eine **robotergestützte Plattform** am HZG generiert Big Data zur Korrosion von Leichtmetallen in komplexen Umgebungen.
- Eine neue **MTC-Prüfeinrichtungen** am DLR wird in 5 Jahren erstmalig die Überlagerung von mechanischer, thermischer und chemischer Belastung von Materialproben erlauben.
- *In situ und operando* **Synchrotron- und Neutronenstreuung** zur Untersuchung des Material- und Bauteilverhaltens werden von DESY, FZJ, HZB und HZG bereitgestellt und erlauben im Zusammenspiel mit KI-Methoden eine schnelle High-Fidelity-Analyse der Werkstoffe.
- Die in der HGF verfügbare (perspektivisch integrierte) **HPC- und QC-Infrastruktur** bis zur höchsten Leistungsklasse am Jülich Supercomputing Center ist die Basis zur Beschleunigung der Materialsimulation vor allem auf der atomaren Ebene.

SYNERGIEN

Durch die Verknüpfung der experimentellen Expertise mit den Methoden der *Digitalisierung*, wie z.B. Werkstoff- und Prozesssimulation, maschinelles Lernen und verknüpfter Algorithmen, wird die werkstoffspezifische Prozess-Struktur-Eigenschafts-Korrelation erfasst und modelliert. Die Entwicklung und Integration intelligenter Sensorik entlang der Prozesskette sowie der direkte Einblick in das Materialverhalten unter den oft extremen Einsatz- oder Prozessbedingungen durch die Nutzung der Charakterisierungsplattformen aus dem FB Materie ist für eine umfassende Datengenese essentiell. Die Verknüpfung mit der Helmholtz-Plattform „*Quantum Technologies*“ würde die Möglichkeit der QC/HPC-basierten Materialsimulation eröffnen. Dies könnte die Basis für eine effiziente Prozessentwicklung für Leichtbauwerkstoffe bilden und gleichzeitig die Brücke zwischen den FBs LRV, Information und Materie herstellen.

WISSENSTRANSFER MIT METHODEN-PLATTFORMEN

Erstklassige experimentelle und skalenübergreifende Daten sowie die Beschreibung von Materialien und Prozessen über Simulation und Modellierung ist eine Grundvoraussetzung, um erfolgreich neue Materialkonzepte zu entwickeln. Daher ist die Kooperation mit den beiden Methoden-Plattformen essentiell und wird konkret über gemeinsame Projekte im Rahmen der JL VMD und MDMC bereits betrieben. Z.B. erfordert die Korrosions- und Lebensdauervorhersage mit Hilfe eines gekoppelten Modellierungsansatzes, der Aspekte der Metallurgie, der Beschichtungstechnologien und der Elektrochemie unter Verwendung von Multiskalen-Simulationswerkzeugen maschinelles Lernen und *state of the art*-Charakterisierungstechniken für die Datenerzeugung beinhaltet, einen engen Wissensaustausch mit beiden Plattformen. Ein integriertes FB-übergreifendes Datenmanagementsystem bietet weiteres Potenzial.

Ziel: Vollständige digitale Beschreibung der gesamten Wertschöpfungskette von der Materialentwicklung über die Herstellung, bis zur numerischen Beschreibung der resultierenden Eigenschaften auf allen Skalenebenen und des Langzeitverhaltens im realen Betrieb

Beteiligte FB: LRV, Information

Beteiligte Zentren: DLR, HZG, KIT

Infrastrukturen: GEMS, MagIC, PETRA III

METHODEN-PLATTFORM „BESCHLEUNIGTE MATERIALENTWICKLUNG“

KURZBESCHREIBUNG

Die Methoden Plattform „*Beschleunigte Materialentwicklung*“ (Materials Acceleration Platform, MAP) bündelt generische Ansätze in der Materialforschung, die darauf abzielen, durch den verstärkten Einsatz automatisierter, zunehmend durch KI selbstgesteuerter Experimente, das Screenings von Materialien um mehrere Größenordnungen zu verkürzen und dadurch die Entwicklung neuer Materialien erheblich zu beschleunigen. Um dies zu erreichen müssen die vorhandenen Potenziale gebündelt werden, um neue Ansätze zur Materialentwicklung zu entwickeln. Aufbauend auf der Strategie der „*virtuellen Materialentwicklung*“ sollen dabei insbesondere Demonstratoren für MAP entwickelt werden. Zahlreiche Forschungsaktivitäten der an dieser Plattform beteiligten Partner zielen schon auf die Entwicklung einzelner hierfür benötigter Komponenten ab, ihre vollständige Implementierung kann jedoch nur gemeinsam erreicht werden. Sowohl die Gruppen in der Europäischen Union, wie auch die amerikanischen und asiatischen Wettbewerber arbeiten gegenwärtig an der Implementierung von MAP, doch auch diese Aktivitäten stehen noch am Anfang. Eine zusätzliche koordinierte Förderung solcher Initiativen eröffnet Deutschland daher einen Wettbewerbsvorsprung.

Aufbauend auf den gegenwärtig verfolgten Ansätzen sollen fundamental neue Ansätze der Materialforschung entwickelt und in die Anwendung getragen werden. Eine wichtige aktuelle Herausforderung ist dabei die Entwicklung von Beschleunigungsplattformen für die Materialentwicklung. Konzeptionell kann eine Beschleunigungsplattform für die Materialentwicklung als eine Pyramide innovativer Technologien verstanden werden (siehe Abb. 13), die ausgehend von gegenwärtig schon untersuchten Verfahren durch die Implementierung weiterer Stufen jeweils neue Innovationsimpulse ermöglicht. Das übergreifende Ziel der Implementierung einer Beschleunigungsplattform für die Materialentwicklung ist die zunehmende Automatisierung des gegenwärtig im Wesentlichen durch manuell durchgeführte Experimente und manuell gesteuerte Simulationen geprägten Materialentwicklungsprozesses in Anlehnung der Automatisierung der Fertigung innerhalb des Konzepts Industrie 4.0. Die letzte noch visionäre Ausbaustufe einer Materialbeschleunigungsplattform erlaubt die vollständig autonome Erforschung von Materialien nach bestimmten Kriterien ohne menschliche Intervention (autonomous discovery).

Um dies zu ermöglichen müssen zuerst die vorhandenen Materialdaten systematisch erhoben und (über Ontologien) semantisch annotiert und zugänglich gemacht werden. Hierzu wird die gegenwärtig implementierte nationale Forschungsdateninfrastruktur (NFDI) einen wesentlichen Beitrag liefern können. Eine zweite Stufe ist die Entwicklung von prädiktiven Simulationsverfahren zur Vorhersage von Materialeigenschaften aus ihrer mikroskopischen Struktur und unter Berücksichtigung des Herstellverfahrens auf den relevanten Zeit- und Längenskalen, die mit wenigen, sorgfältig ausgewählten Experimenten gestützt werden. Grundlage hierfür sind die Arbeiten in der virtuellen Materialentwicklung die in der laufenden PoF-Periode intensiviert werden müssen. Das günstige Kosten-Nutzen-Verhältnis rechnergestützter Ansätze macht prädiktive Simulationen und „*digitale Zwillinge*“ zu Schlüsselkomponenten der zukünftigen Materialforschungsstrategie. Die systematische Anwendung derartiger Verfahren ermöglicht mit dem inversen Design einen Innovationssprung, der die rechnergestützte (d.h. daten- und simulationsbasierte) Entwicklung von Materialien ausgehend von (idealerweise) funktionalen Spezifikationen ermöglicht.

Die vierte Stufe einer solchen Materialentwicklungsplattform ist die Implementierung einer weitgehend autonom operierenden Robotik, die sowohl Synthese, wie auch die Charakterisierung der resultierenden Materialien weitgehend automatisiert. Die Entwicklung dieser neuartigen experimentellen Apparaturen ist eine der wichtigsten und aufwändigsten Herausforderungen in der Realisierung von MAP. Obwohl derartige Plattformen sind in Einzelfällen, wie zum Beispiel in der

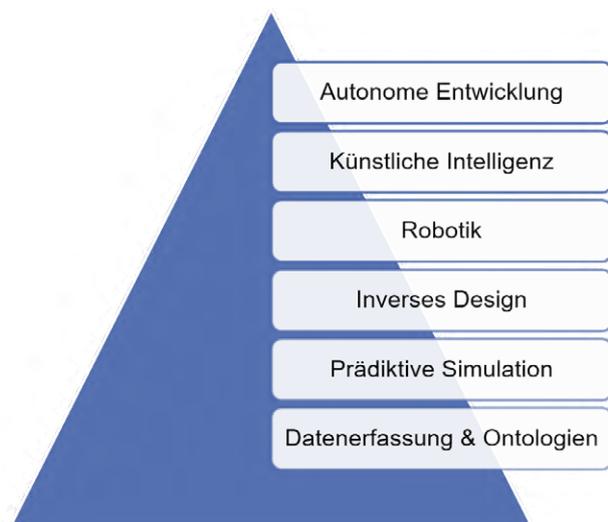


Abb. 13: Schematische Darstellung der aufeinander aufbauenden Elemente einer Beschleunigungsplattform für Materialien (Quelle: KIT).

Pharma-forschung schon realisiert sind, ist das Ziel dieser Initiative die systematische Entwicklung einer Infrastruktur, die eine automatisierte Materialsynthese und Charakterisierung für eine Vielzahl von Materialklassen modular ermöglicht. Sowohl die Entwicklung der Komponenten, wie auch der Gesamtsysteme bietet erhebliches Innovations- und Transferpotenzial. Die fünfte Stufe einer solchen Materialentwicklungsplattform beinhaltet die weitgehende Unterstützung des Material-Entwicklungsprozesses durch Robotik, die Simulation, Datenanalyse, künstliche und Intelligenz in Steuerungs- und Regelungsstrategien integriert. Die Materialentwicklung ist in fast allen Anwendungen durch sehr große Suchräume charakterisiert, die auch durch Hochdurchsatzverfahren nur in Bruchteilen durchsucht werden können. Daher müssen systematische Verfahren der Modell- und KI-basierten algorithmischen Versuchsplanung entwickelt werden, die menschliche Intuition auf Basis eines iterativen Informationsgewinns durch Experimente und Simulation ersetzen. Im Zusammenwirken mit den anderen Komponenten generiert die Verfügbarkeit dieser Algorithmen ein Alleinstellungsmerkmal für die entsprechende Materialentwicklungsplattform.

Die letzte und sechste Stufe der Entwicklung einer Material-Entwicklungsplattform implementiert eine zunehmende Reduktion der menschlichen Intervention der algorithmisch gestützten Materialentwicklung zu einer vollständigen Automatisierung im Sinne einer selbstlernenden, autonomen Materialentwicklung. Die Implementierung eines solchen Ansatzes generiert ein über die fünfte Stufe hinausgehendes, weiteres Skalierungspotenzial in der Anwendung der Materialentwicklungsplattform.

Ziel dieses stufenweisen Vorgehens ist eine Erhöhung der Geschwindigkeit in der Materialentwicklung um jeweils eine Größenordnung in

- Stufe 1-2: Datenerfassung und Simulation
- Stufe 3: inverses Design
- Stufe 4: Robotik
- Stufe 5 & 6: autonome, selbstlernende Entwicklungsplattform,

sodass die Realisierung dieses Konzepts in einem Zeitraum von zehn Jahren zu einer Vergrößerung des Suchraums in der Materialentwicklung um einen Faktor von etwa 1000 führt.

AKTUELLE AKTIVITÄTEN UND MITTELFRISTIGE ZIELE IN DER POF IV

- Im JL VMD entwickelt der FB Information unter Beteiligung des DLR eine virtuelle Arbeitsumgebung zur Durchführung komplexer Simulation und ein hybrides, integriertes Datenmanagementsystem. Diese verbundenen Plattform sollen es ermöglichen, die Elemente der Prozesskette vom Material bis zur automatisierten Produktion miteinander digital zu verknüpfen und neue Materialien in einem virtuellen Prozess zu erforschen.
- Die virtuelle Materialentwicklung und Konzepte zur Virtualisierung der Materialentwicklung werden in der PoF IV in mehreren Zentren weiterentwickelt.
- Die HGF verfolgt systematisch den Aufbau von automatisierten und zunehmend selbst-gelenkten Experimenten. Für einige Anwendungen (z.B. Biokatalysatoren oder Batterien) sind Robotik-Systeme für Hochdurchsatz-Experimente bereits etabliert oder im Aufbau. Diese Arbeiten werden intensiviert und durch eine systematische Kosten-Nutzen-Analyse im Hinblick auf einen Transfer in die Industrie ergänzt.
- In den beteiligten Instituten mit Schwerpunkt in der Materialforschung wird die thermodynamische und/oder die *ab initio*-Simulation von Materialien und die dazu nötige digitale Infrastruktur weiter gezielt ausgebaut. Im Fokus stehen die anwendungsorientierte Nutzung und Adaption dieser Werkzeuge, deren Validierung und des Feedbacks an die Werkzeug-Entwickler. Zudem werden KI-basierte Werkzeuge zur Auswertung großer Datenmenge aus der Werkstoffanalyse adaptiert bzw. entwickelt.
- Mehrere Zentren entwickeln „Digitale Zwillinge“, e.g. für Quantenmaterialien, für organische Materialien, für gedruckte Elektronik, die auch das Verhalten des Materials in der Anwendung berücksichtigen.

LANGFRISTIGE STRATEGISCHE ZIELE

- Eine integrierte, einrichtungsübergreifende virtuelle Arbeitsumgebung für Daten und Simulationen, die die **skalenübergreifende Generierung und Nutzung** von materialspezifischen Daten ermöglicht.
- Hochauflösende Materialanalyse (s. Methoden-Plattform „Korrelative Multimethoden Materialcharakterisierung“) und die KI-basierte Auswertung der Daten ist zur Validierung der Simulation auf allen Skalen etabliert.
- **Beschleunigung von Materialentwicklung durch virtuelles Materialdesign.**
- Einsatz von KI-Methoden als Prescreening-Verfahren für die gezielte Durchführung von **Multiskalen Simulationen** und zur Steuerung von Experimenten.

- **Exascale- und Quanten-Computing** stehen als Werkzeuge zur thermodynamischen, kinetischen und *ab initio*-Simulation zur Verfügung und erlaubt die Beschleunigung und die Steigerung der Simulationsqualität. Zur Ermöglichung und Beschleunigung von quantenmechanischen Material-Simulationen wird der Quantencomputer (QC) einen entscheidenden Beitrag leisten. Der Fokus der wissenschaftlichen Arbeiten liegt dabei auf der Entwicklung der dazu nötigen QC/HPC-Plattform, den Quanten-Algorithmen und dem integrierten Datenmanagementsystem inklusive der Fehlerkorrektur. Neben Beschleunigung und Qualitätssteigerung lässt sich damit auch der durch die menschlichen Kapazitäten limitierte Suchraum für neue Materialien durch ein QC- und Maschinenlernen basiertes Rapid Screening deutlich erweitern. Damit können Materialzusammensetzungen gefunden werden, die heute noch unsichtbar bleiben. Die HGF kann aufgrund des spezifischen Kompetenzprofils hier eine weltweit führende Position einnehmen.
- Methoden der schnellen Herstellung und Prüfung / Analyse der Materialien ergänzen komplementär die digital beschleunigte Materialentwicklung. Ein Augenmerk liegt dabei auch auf neuen Verfahren, die unter Zuhilfenahme von Machine Learning-Ansätzen eine schnellere Prüfung/Analyse erlauben.
- Entwicklung einer Reihe von „digitalen Zwillingen“ im Joint Lab „Virtual Materials Design“ (JL VMD, FB Information), die Prozesse vom Materialdesign bis zur Materialverarbeitung und -anwendung abbilden. Sie sollen beispielhaft aufzeigen, wie reales Materialdesign durch virtuelles Materialdesign deutlich beschleunigt werden kann.

WESENTLICHE ZUKÜNFTIGE AKTIVITÄTEN

- Die virtuelle Arbeitsumgebung zur gezielten Nutzung neuer digitaler Werkzeuge zur Beschleunigung und zur Steigerung der Qualität der Materialsimulation und der digitalen Materialentwicklung wird gezielt ausgebaut und bereitgestellt. Im Fokus stehen HPC-fähige nicht-kommerzielle Werkzeuge zur Simulation komplexer Systeme auf der Meso- und Makroskala, neue Methoden des Datenmanagements über Zent-

ren hinweg, der KI zur Auswertung großer Datenmengen und der thermodynamischen bzw. *ab initio*-Simulation.

- Eine **neue digitale Plattform zur beschleunigten Bewertung und Vorhersage von Materialabbau** in komplexen Umgebungen wird auf Ansätzen künstlicher Intelligenz zur Analyse großer Datenmengen basieren, die von einer robotisierten Plattform erfasst wurden.

AUSGEWÄHLTE INFRASTRUKTURNUTZUNG

- Das DLR entwickelt das sich im Aufbau befindliche DLR Future Lab for Additive Manufacturing and Engineering (**FLAME**) auch zu einem Werkzeug zur schnellen Herstellung von neuen metallischen Legierungen.
- Das HZG entwickelt derzeit eine Roboterplattform zur schnellen Erfassung großer Datenmengen über die Interaktionen zwischen Material und komplexen Umgebungen.
- Das KIT entwickelt eine **Robotik-Plattform für Hochdurchsatzexperimente** für Batteriematerialien und für organische Synthese.
- Die im JL VMD beteiligten Partner nutzen die Höchstleistungsrechenzentren der Helmholtz-Gemeinschaft.
- Neutronen- und Synchrotronstrahlung werden verstärkt zur *in situ*-Charakterisierung neuer Werkstoffe und deren Prozessierung eingesetzt.

SYNERGIEN

- Entwicklung von *ab initio*-Werkzeugen und Nutzung der HPC- und Quantencomputerkompetenzen.
- Hochauflösende Analysen von Werkstoffen.
- Austausch von Workflows zur virtuellen Materialentwicklung in der HGF und darüber hinaus.
- Nutzung der Techniken für korrelative Charakterisierung.

MEHRWERT / WISSENSTRANSFER FÜR DIE SCHWERPUNKTTHEMEN

- Schnellere Verfügbarkeit neuer Materialien und ein breiteres Spektrum an neuen Materialien für die Anwendungen der Schwerpunktthemen.
- Verbesserte Methoden zur schnellen, hochauflösenden Charakterisierung.
- Erweiterter und schnellerer digitaler Einbezug von anwendungsspezifischen Anforderungen.

Ziel: beschleunigte Materialentwicklung durch Virtualisierung und *Digitalisierung*

Beteiligte FB: Information, Energie, Materie

Beteiligte Zentren: KIT, FZJ, HZB, HZDR, HZG, DLR

Infrastrukturen: JSC, CSD, HDF, LSDF, HPC-KIT, KNMF, MBC, HTC/PTC, DiLAB, IBC, HLD, ELBE

METHODEN-PLATTFORM „KORRELATIVE MULTIMETHODEN MATERIALCHARAKTERISIERUNG“

KURZBESCHREIBUNG

Die Helmholtz-Gemeinschaft betreibt ein weltweit einzigartiges Portfolio ausgezeichnete Instrumente zur 2D- und 3D-Charakterisierung von Materialien mit höchster struktureller und chemischer Auflösung, die häufig komplementäre Informationen liefern. Die Plattform für „*Korrelative Multimethoden Materialcharakterisierung*“ bietet Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern, die in verschiedenen Forschungsbereichen der Helmholtz-Gemeinschaft arbeiten, und externen Nutzern, Zugang zu diesen modernsten multiskaligen und multidimensionalen Charakterisierungstechniken, basierend auf hochauflösenden Mikroskopie-, Spektroskopie- und Streuexperimenten. Bei der Charakterisierung fallen zudem häufig große Datenmengen in unterschiedlichsten Formaten an, deren Aggregation für eine übergreifende Analyse erforderlich ist. Die Plattform konzentriert sich in erster Linie auf Forschungsinfrastrukturen und -techniken, die in die FB Information (u.a. Joint Lab „*Integrated Model and Data driven Material Characterization*“, JL MDMC) und FB Materie (Programm MML und Topic „*Data management and Analyse*“ im Programm MT) eingebettet sind. Es existieren aber auch Brücken in die anderen Forschungsbereiche, z.B. über die „*Helmholtz Imaging Plattform*“ (HIP). Für die in diesem Papier vorgestellten Schwerpunktthemen ist diese Plattform von zentraler Bedeutung und es gibt eine Vielzahl von Vernetzungen mit der Plattform „*Beschleunigte Materialentwicklung*“.

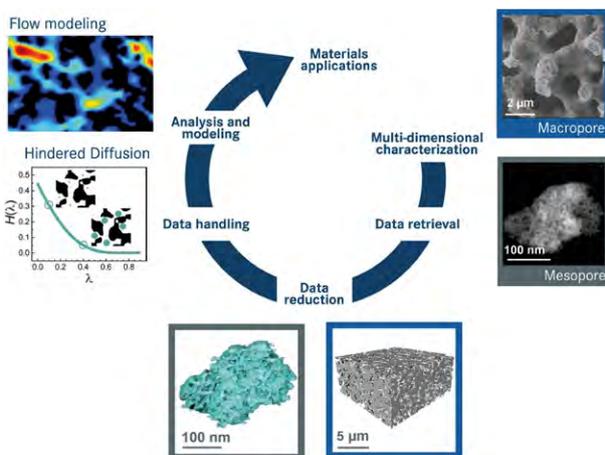


Abb. 14: Workflow-Beispiel in der Methodenplattform (Quelle: FZJ).

AKTUELLE AKTIVITÄTEN UND MITTELFRISTIGE ZIELE IN DER PO F IV

Modernste Materialcharakterisierungstechniken mit zunehmender Betonung auf Skalenüberbrückung durch korrelative und *in situ* und *operando*-Studien leisten einen entscheidenden Beitrag zum Fortschritt in der Materialentwicklung und neuer Technologien. Die Untersuchung der gleichen Proben mit unterschiedlichsten Methoden, z.B. Kombinationen aus Röntgen- oder Neutronenabbildung oder aus Beugung und Raster- oder Transmissionselektronenmikroskopie werden bereits in unterschiedlicher Form in der Helmholtz-Gemeinschaft realisiert:

- **KMNF (KIT)** bietet Nutzern ein Portfolio von Technologien im Bereich Mikro- und Nanostrukturierung und Charakterisierung, die z.T. schon in korrelativen Ansätzen genutzt und deren Möglichkeiten weiterentwickelt werden (Rastersondenmethoden, Röntgentomographie, Kernmagnetresonanz, Elektronen- und Ionenstrahlanalytik).
- DESY offeriert komplementäre Untersuchungen durch Synchrotronstrahlungsexperimente bei **PETRA III** und **Rastersondenmethoden oder Tomographie** mit einem fokussierten Ionenstrahl im DESY NanoLab.
- Im **ER-C (FZJ)** werden Elektronenmikroskopie- und Rastersondenmikroskopiestudien zur Untersuchung von strukturellen, elektronischen und funktionalen Eigenschaften von Materialien kombiniert. Zudem werden, in Zusammenarbeit mit Kooperationspartnern, die elektronenmikroskopische und synchrotronstrahlenbasierte Charakterisierung für korrelative Untersuchungen an identischen Probenstellen und *operando*-Studien der Funktionsmechanismen von z.B. Katalysatoren genutzt. Komplementäre Methoden zur Charakterisierung solcher Proben werden durch Neutronenstreu-Experimente vom **JCNS (FZJ)** angeboten.
- **GEMS (HZG)** fokussiert sich auf korrelative materialwissenschaftliche Untersuchungen mit Schwerpunkt auf *in situ* und *operando* Studien mit Synchrotron- und Neutronenstrahlen.
- GSI bietet korrelative Untersuchungen der Effekte von hochenergetischen Ionenstrahlen auf Materialien (auch unter extremen Bedingungen) unter Einsatz von verschiedenen **mikroskopischen und spektroskopischen Charakterisierungsmethoden**.
- Am HZB stehen die komplementären synchrotronbasierten (**BESSY II**) und laborbasierten (**HZB CoreLabs**) Charakterisierungsmethoden für Wissenschaft und Industrie zur Verfügung. Der Schwerpunkt der Labormethoden liegt auf der Rasterelektronen- und Ionenmikroskopie sowie der Röntgendiffraktometrie und -bildgebung.

Eine große Herausforderung ist das Datenvolumen, das durch die immer leistungsfähigeren Charakterisierungstechniken erzeugt wird. Eines der wichtigsten Ziele der Plattform für „*Korrelative Multi-Methoden Materialcharakterisierung*“ wird daher die **Entwicklung von Ansätzen zur Auswahl der relevanten Daten, Datenreduktion und -analyse** sein, die in der Lage sind, die Datenraten und Datenmengen moderner experimenteller Charakterisierungstechniken zu adressieren. Es wird angestrebt, moderne auf künstlicher Intelligenz basierende Methoden in Zukunft verstärkt in diesem Feld einzusetzen.

Die Plattform für „*Korrelative Multimethoden Materialcharakterisierung*“ wird sich zunächst auf die Materialcharakterisierung mit folgenden Techniken konzentrieren: Elektronenmikroskopie im ER-C in FZJ und KNMF am KIT, Kernmagnetresonanz im KNMF am KIT (auch mit Kombination von Röntgenanalytik) und synchrotronstrahlungsbasierte Studien am DESY, HZG und HZB in Kombination mit Rastersondenmikroskopie und Focused Ion Beam (FIB) Nanotomographie, auch in Kombination mit Neutronen im JCNS in FZJ / GEMS (HZG) am MLZ, und Materialmodifizierung mit Ionenstrahlen und deren korrelative *in situ* Charakterisierung am GSI und HZDR-IBC, sowie die Charakterisierung exotischer Materialphasen unter extremen Bedingungen sowie von ultraschnellen Prozessen am GSI, FLASH und European XFEL.

Der materialbezogene Workflow wird zunächst für drei spezifische Materialherausforderungen demonstriert: a) Korrosion und Degradierung von Weich-, Hart- und Hybrid-Materiesystemen, einschließlich ihrer Wechselwirkung mit der Umwelt, und die Veränderung von Materialien unter extremen Bedingungen; b) Dynamik von Katalysatoren, einschließlich korrelativer Studien, die mit synchrotronbasierten Charakterisierungsmethoden durchgeführt werden; c) ultraschnelles Umschalten von nanoskaligen magnetischen Texturen und resistiven Schaltelementen für hirnpinspierte Computeranwendungen. Für jedes Material umfasst das Arbeitsprogramm eine dreidimensionale, zeitaufgelöste *in situ*-Charakterisierung über mehrere Längenskalen. Zusammengefasst spannen die Experimente räumliche Auflösungen vom Meter- bis in den sub-Nanometerbereich. Die zeitliche Auflösung umfasst den Bereich von Stunden bis Femtosekunden. Methoden des maschinellen Lernens sind des Weiteren die Grundlage für eine vollständige und schnelle Auswertung von großen Datenmengen aus hochauflösenden 3D-/4D-Analyseverfahren als Input für die Durchführung bzw. Validierung von skalenübergreifenden Simulationen.

Während des PoF IV-Zeitraums wird die Plattform für „*Korrelative Multimethoden Materialcharakterisierung*“ ihren Anwendungsbereich schrittweise auf weitere Techniken ausdehnen und dabei auch präzise Fertigungstechnologien wie die Entwicklung optimierter mikrofluidischer/nanofluidischer Systeme einschließen. Zudem werden Anwendungsfelder anderer Forschungsbereiche einbezogen.

Gezielte Kooperationen, wie z. B. die Zusammenarbeit mit Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler im Programm „*Matter and Technologies*“, Topic „*Detector Systems MT-DTS*“ und dem FB Information für die Entwicklung von zweidimensionalen Hochgeschwindigkeits-Pixel-Array-Detektoren zur Aufzeichnung von Röntgen- und Elektronensignalen mit einer zeitlichen Auflösung von unter 100 ps, werden verwendet, um einzigartige zeitaufgelöste Messungen der magnetischen und elektronischen Dynamik unter GHz- oder optischen Stimuli durchzuführen.

LANGFRISTIGE STRATEGISCHE ZIELE

Diese forschungsbereichsübergreifende Plattform für Materialcharakterisierung hat folgende Ziele:

- Einrichtung einer **zentren-, programm- und themenübergreifenden experimentellen Multi-Methoden-Plattform**, die Zugang zu modernsten Techniken zur Modifizierung und multiskaligen und multidimensionalen Charakterisierung von Materialien bietet.
- Aufbau einer **Daten- und Informationsplattform** mit Schwerpunkt auf der Analyse von Daten aus kombinierten Techniken, die mit hohen Datenraten und -volumina gewonnen werden, um die Komplexität von Materialien, ihre Strukturentwicklung und ihre Wechselwirkungen in komplexen Systemen zu verstehen.
- Entwicklung von Arbeitsabläufen, die korrelative Materialcharakterisierung und Analyse miteinander verknüpfen, mit speziellem Fokus auf korrelative und *in situ/operando*-Studien, die z.B. mit Elektronenmikroskopie, NMR und/oder Röntgenstrahlen, Neutronen oder Ionen durchgeführt werden. Diese Arbeiten werden in enger Zusammenarbeit mit Forschenden durchgeführt, die an der Modellierung und Simulation in der Plattform „*Beschleunigte Materialentwicklung*“ und in der Datenwissenschaft arbeiten.
- Aufbau gemeinsamer, **forschungsbereichsübergreifender Aktivitäten zur Entwicklung von Modifizierungs- und Charakterisierungstechniken und Datenanalysewerkzeugen**, wie z.B. gemeinsame Entwicklung von (*on line*-)Visualisierungs- und Bildverarbeitungswerkzeugen, die Standardisierung von Proben, Probenträgern und Umgebungsbedingungen oder die Identifikation und Vergleich von Artefakten verschiedener Methoden.

- Erweiterung des Anwendungsbereichs der Multimethoden- und Daten- bzw. Informationsplattform auf weitere Charakterisierungstechniken sowie auf andere Forschungsbereiche der Helmholtz-Gemeinschaft.

WESENTLICHE ZUKÜNFTIGE AKTIVITÄTEN

- Ausdehnung der Zusammenarbeit der FB Information und Materie auf andere Forschungsbereiche, um optimierte Ansätze für Herausforderungen zu entwickeln, die modulare Lösungen für die hochgradige Wissensextraktion aus Daten benötigen, die an Großanlagen mit ergänzenden Techniken erzeugt werden, sowie für den Zugang zu diesen Lösungen.
- In Zusammenarbeit mit der Plattform „*Beschleunigte Materialentwicklung*“ werden **Datenanalysen und -modellierungen** durchgeführt. Hier wird ebenfalls das Jülicher Zentrum für Supercomputing (JSC) einbezogen, dass das Konzept der zentralen Datenplattform sowohl auf Hardware- als auch auf Softwareebene ergänzt.
- **Entwicklung von KI-Ansätzen** für die Echtzeit- und automatisierte Datenerfassung und -analyse zur Optimierung von Arbeitsabläufen.
- Optimierung pychografischer und spektroskopischer Techniken für Studien von schwach streuenden Materialien und chemisch empfindlichen Signalen.
- Entwicklung neuer Ansätze für die Probenübertragung zwischen den verschiedenen Messmethoden.
- Entwicklung korrelativer Charakterisierungsmethoden für die Untersuchung von Materialien unter extremen Bedingungen von Druck, Ionen- und Laser-Bestrahlung, und Temperatur.
- Zusammenarbeit mit der Helmholtz Imaging Plattform (HIP) zur Entwicklung von mehrdimensionalen online Visualisierungstools.

Die Plattform wird im Sinne der FAIR-Datenprinzipien die Zugänglichkeit der Daten, die Standardisierung von Datenformaten und die Definition bewährter Verfahren vorantreiben. Darüber hinaus soll ein Standard für elektronische Laborbücher für die Multimethodencharakterisierung einer Probe entwickelt werden.

AUSGEWÄHLTE INFRASTRUKTURNUTZUNG

- Die Multi-Methoden-Plattform basiert zunächst auf mehreren Infrastrukturen: dem Ernst Ruska-Zentrum für Mikroskopie und Spektroskopie mit Elektronen (**ER-C**) im FZJ und der Karlsruher Nano Micro Facility for Information (**KNMFi**) am KIT, **PETRA III** (DESY) mit dem **DESY NanoLab**, **GEMS** (HZG), **BESSY** (HZB), **MLZ** (FZJ), **ELBE**, **HLB**, **IBC** (HZDR), Experimentierplätze am **UNILAC**, **SIS-18** und **CRYRING** (GSI/FAIR), **European XFEL** und dem Jülicher Zentrum für die Forschung mit Neutronen (**JCNS**) am FZJ und **MLZ**.
- Darüber hinaus werden Entwicklungen im Rahmen der geplanten Plattform InnoMatSy (*in Situ* Innovation Platform for Multifunctional Materials Systems, s. Kapitel VI) als Ergänzung zu Aktivitäten der Plattform für „*Korrektive Multimethoden Materialcharakterisierung*“ genutzt.

SYNERGIEN

Helmholtz: Beispiele sind Kooperationen mit der Plattform „*Beschleunigte Materialentwicklung*“, dem Jülicher Supercomputing-Zentrum oder auch Initiativen wie **InnoMatSy** und Helmholtz Energy Materials Characterization Platform (**HEMCP**) und dem Energy Materials *In-Situ* Laboratory Berlin (**EMIL**). Für bildgebende Methoden ist eine Zusammenarbeit mit der Helmholtz Imaging Plattform (HIP) geplant. Zu den Themen Datenmanagement und -analyse existiert eine Vielzahl von Vernetzungen im Forschungsbereich Information und darüber hinaus. Die Plattform trägt zu großen nationalen und internationalen Initiativen wie NFDI und weiteren bei.

In dem gemeinsamen Positionspapier **ARIE** (Analytical Research Infrastructures in Europe) wird hervorgehoben, wie ein gemeinsamer, komplementärer Ansatz der analytischen Forschungsinfrastrukturen in Europa dazu beitragen wird, die gesellschaftlichen Herausforderungen des Rahmenprogramms „*Horizon Europe Missions*“ anzugehen. Verbindungen zu europäischen Materialcharakterisierungsplattformen wie **NFFA** (Nano foundries for fine analysis), sowie dem Netzwerk **ES-TEEM3** (Enabling Science and Technology through European Electron Microscopy) werden ausgebaut. Innerhalb von **LEAPS** (League of European Accelerator-based Photon Sources), **LENS** (League of advanced European Neutron Sources) und **RADIATE** (Research And Development with Ion Beams – Advancing Technology in Europe) werden methodische Weiterentwicklungen für Synchrotron-, Neutronen- und Ionenanlagen im europäischen Kontext gebündelt. Ein weiterer Synergieeffekt liegt in der Kombination von Know-how in Charakterisierung und Modellierung mit Anwendungen und Data Science.

MEHRWERT / WISSENSTRANSFER FÜR DIE SCHWERPUNKTTHEMEN

Die Plattform für „*Korrelative Multimethoden Materialcharakterisierung*“ bietet Verfahren an, mit denen Fragestellungen aus den Schwerpunkthemen Leichtbau, Wasserstoff, Batterien, Lebens- und Gesundheitsforschung und *Nachhaltigkeit* bearbeitet werden können, und ein Wissenstransfer sichergestellt wird. Die hier vorgestellte FB-übergreifende experimentelle Methodenplattform ist essentiell, um eine leistungsstarke Daten- und Informationsbasis für den „*digitalen Zwilling*“ zu etablieren. Mittels eines generischen Ansatzes wird das Verständnis von Aufbau und Verhalten komplexer Materialsysteme und ihrer Funktionen zur Erstellung skalen- und prozessübergreifender Modelle von materialwissenschaftlichen und biologischen Systemen entwickelt und validiert werden. Somit lassen sich mit Hilfe von „*Use Cases*“ prädikative Materialsimulationen zusammen mit der Plattform „*Beschleunigte Materi-*

alentwicklung“ entwickeln. Durch ein systematisches Materialscreening basierend auf dem Multimethodenansatz der Plattform lassen sich in der Informationstechnologie und für photovoltaische Materialien die Entwicklung neuartiger Ansätze und der Einsatz neuer Materialkombinationen effizient erforschen. Kombinatorische *in situ*- und *in operando*-Methoden erlauben direkte Einsichten in die beim Betrieb von Batteriematerialien auftretenden, elementaren Prozesse. Darüber hinaus liefern sie wichtige Erkenntnisse für die Entwicklung effizienterer Materialien für die Wasserstofftechnologie. Die Kombination der Methoden erlaubt eine orts aufgelöste Untersuchung der Biokompatibilität von Materialien in der Gesundheitsforschung und eine direkte Zuordnung von Versagensmechanismen von Leichtbaumaterialien. Korrelative Analysemethoden sind daher essentiell, um die neuen Materialien der verschiedenen Schwerpunkthemen zu untersuchen, zu verstehen und zu verbessern.

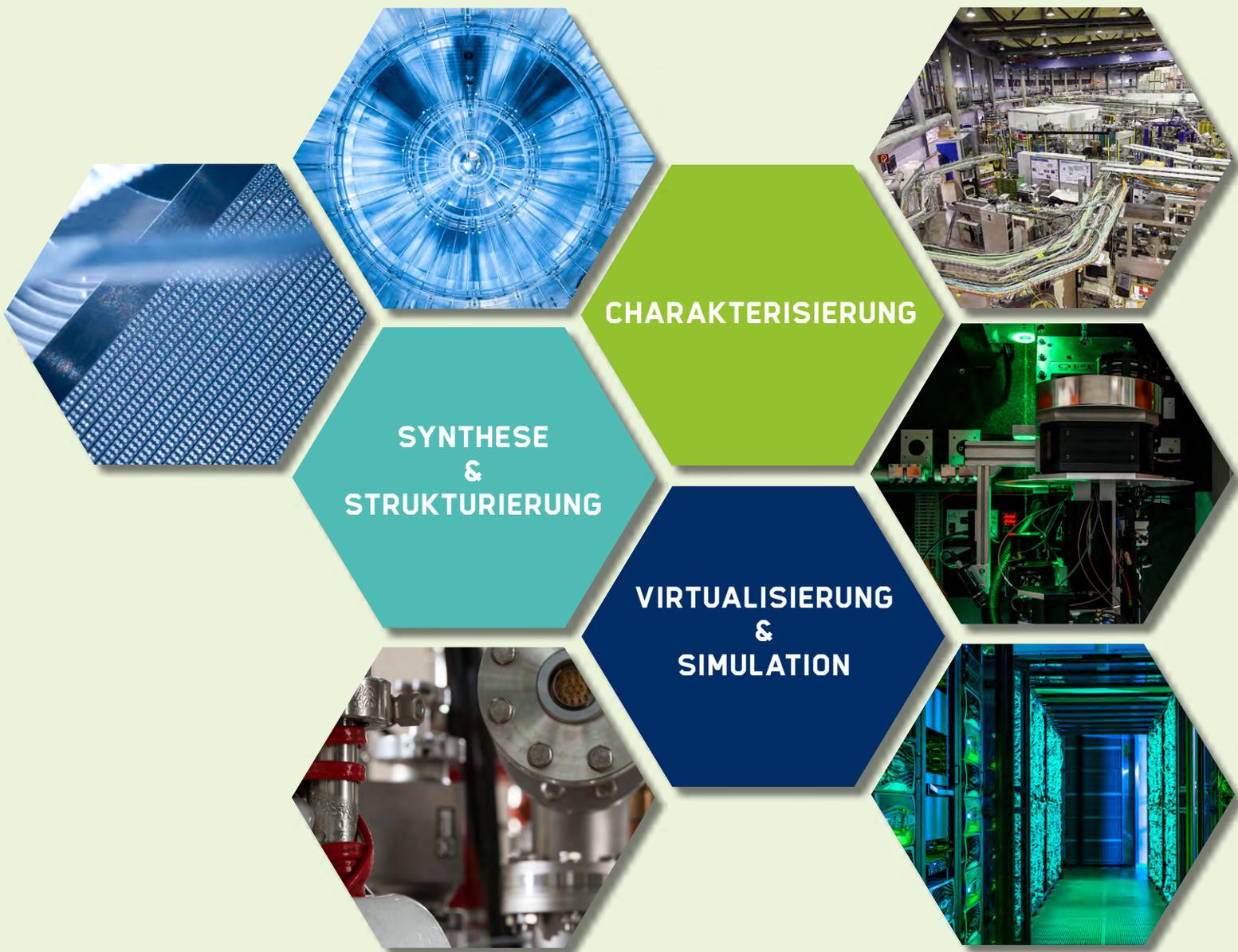
Ziel: forschungsbereichsübergreifende Plattform für korrelative Multimethoden Materialcharakterisierung und Datenreduktion

Beteiligte FB: Information, Materie, Energie, Gesundheit

Beteiligte Zentren: HZDR, DESY, KIT, FZJ, HZB, HZG, GSI-FAIR

Infrastrukturen: PETRA III, FLASH, European XFEL, ER-C, BESSY II, KNMF, JCNS, GEMS, IBC, LSDF, JARA-CSD, HPC-KIT, DiLAB, UNILAC, CRYRING, SIS-18, KARA, ELBE, HLD

VI.FORSCHUNGSINFRASTRUKTUREN UND GROSSGERÄTE



Die interdisziplinäre Materialforschung der oben genannten Forschungsbereiche basiert auf den nachfolgend dargestellten großen Infrastrukturen, die zu einem großen Teil auch Forschenden über die Helmholtz-Gemeinschaft hinaus zur Verfügung stehen.

SYNTHESE UND STRUKTURIERUNG VON MATERIALIEN

Helmholtz Nano Facility (HNF): Die HNF am FZJ ist eine hochmoderne großflächige Reinraum-Anlage mit einer Vielzahl von Bearbeitungswerkzeugen für die Strukturierung von Materialien im Nanometermaßstab. Mit einem interdisziplinären Ansatz, der Elektrotechnik und Physik mit Chemie und Biologie verbindet, bietet sie Werkzeuge für die Verarbeitung eines breiten Spektrums von anorganischen Materialien wie Silizium, III-V-Halbleitern, Supraleitern, topologischen Isolatoren, Graphen, Metallen und Oxiden. Eine zukünftige Ausweitung der Kapazitäten auf die Bedürfnisse der Forschungsgebiete Quanten- und neuromorphes Computing ist ebenfalls geplant.

Helmholtz Quantum Center (HQC): Mit dem HQC wird in Jülich ein zentrales Technologielabor der Helmholtz-Gemeinschaft etabliert, um den wissenschaftlichen und technologischen Herausforderungen beim Bau eines europäischen Quantencomputers zu begegnen. Das Helmholtz Quantum Center verbindet Grundlagenforschung, Theorie und Entwicklung im Quantencomputing, von Quantenmaterialien bis hin zu kompletten Quantencomputersystemen. Forschung an Werkstoffen für Qubits wird verknüpft mit der Fertigung von Geräten und Systemen für Quantencomputer und dem Co-Design von Hard- und Software. Das HQC befindet sich im Aufbau und wird voraussichtlich Anfang 2025 in Betrieb gehen.

Karlsruhe Center of Optics & Photonics (KCOP): Das KCOP am KIT ist eine in der Umsetzung befindliche Reinrauminfrastruktur, die als multidisziplinäre Forschungsplattform im Bereich Optik und Photonik anwendungsrelevante Grundlagenforschung ermöglichen wird. Die Forschung in der KCOP adressiert große Herausforderungen in den Forschungsgebieten zur Informationsverarbeitung und Datenübertragung, effizienter und nachhaltiger Energiesysteme, der Lebenswissenschaften und Medizintechnik. Die Investitionsmaßnahme wird derzeit umgesetzt und voraussichtlich ab 2024 in Betrieb gehen.



Helmholtz Energy Materials Foundry (HEMF): HEMF ist eine groß angelegte kollaborative F&E-Plattform, die sich der Synthese neuer Materialien für Energieumwandlungs- und Speicheranwendungen widmet. Sie wird als internationale Nutzereinrichtung für akademische und industrielle Partner betrieben. Der wissenschaftliche Schwerpunkt liegt auf Materialien und Anwendungen im Bereich Solarzellen, solare Brennstoffe, Brennstoffzellen, Batterien, Thermoelktrika und Thermochemie. Projektstart war der 1. Januar 2016. Beteiligt sind HZB (federführend), DLR, FZJ, HZDR, HZG, KIT, und GSI.

Biomedizintechnik (BMT): Im HZG Biomedizintechnikum erfolgt die translationale Biomaterialforschung mit den Schwerpunkten multifunktionale polymere Biomaterialien und weiche Aktuatoren. Hierzu wurden u.a. Reinraumlabor geschaffen um die qualifizierte Herstellung von Biomaterialien zu ermöglichen. Die translationale Forschung hat einen Schwerpunkt in der Erstanwendung beim Menschen, welche am Berlin-Brandenburger Centrum für Regenerative Therapien (BCRT), dem gemeinsamen klinischen Translationszentrum von HZG und Charité, sowie ggf. unter Einbeziehung von weiteren klinischen Einrichtungen, wie bspw. dem Ernst-von-Bergmann-Klinikum, erfolgt.

Future Lab for Additive Manufacturing and Engineering (FLAME): Diese Forschungsplattform des DLR führt die Aktivitäten zum 3D-Druck im DLR zusammen. In diesem Kontext wurde in den letzten Jahren ein Park aus modernen 3D-Druckern für den Druck von Metallen, Polymeren und Keramiken aufgebaut, der bis Ende 2020 um weitere Maschinen vor allem für den metallischen 3D-Druck ergänzt wird. Auf der Basis dieser Verfahrenstechniken werden z.B. neue Pulver, neue 3D-spezifische Legierungen, schnell erstarrte Legierungen, verstärkte und unverstärkte Polymere und hybride Materialien entwickelt.

NanoLab: Das DESY NanoLabor bietet Zugang zu hochauflösenden Materialcharakterisierungs- und Strukturierungsmethoden, die zur Probenvorbereitung und deren komplementären Analyse für Experimente an den DESY Lichtquellen eingesetzt werden. Durch die DESY NanoLab Markertechnologie können korrelative Multimethodenuntersuchungen sowohl an den Strahlführungen der Synchrotronstrahlungs- und FEL-Quellen als auch an Labormesseinrichtungen an Materialien auf der Nanometerskala durchgeführt werden. Darüber hinaus betreibt das DESY NanoLab ein dediziertes Elektrochemielabor für die Untersuchung von elektrochemischen

und elektro-katalytischen Prozessen in der Energieumwandlung.

Magnesium Innovationszentrum (MagIC): Der Forschungsschwerpunkt von MagIC am HZG liegt in der Entwicklung von magnesium-basierten Werkstoffen für diverse Anwendungen (z. B. im Transport- und im medizinischen Bereich). Das Zentrum konzentriert sich dabei vor allem auf die Bereiche der Entwicklung neuer Legierungen mit einem Fokus auf Magnesiumknetlegierungen, deren Verarbeitung, sowie Korrosions- und Oberflächenschutz.

Polymer und Wasserstoff Technology Center (PHTC): Das Zentrum am HZG wurde gegründet, um die photoelektrochemische Wasserstoffherzeugung und Wasserstoffspeicherung weiterzuentwickeln sowie die hochskalierte Polymersynthese und den Transfer von membran-basierten Trenntechnologien hin zu industriellen Anwendungen zu fördern.

CHARAKTERISIERUNG VON MATERIALIEN

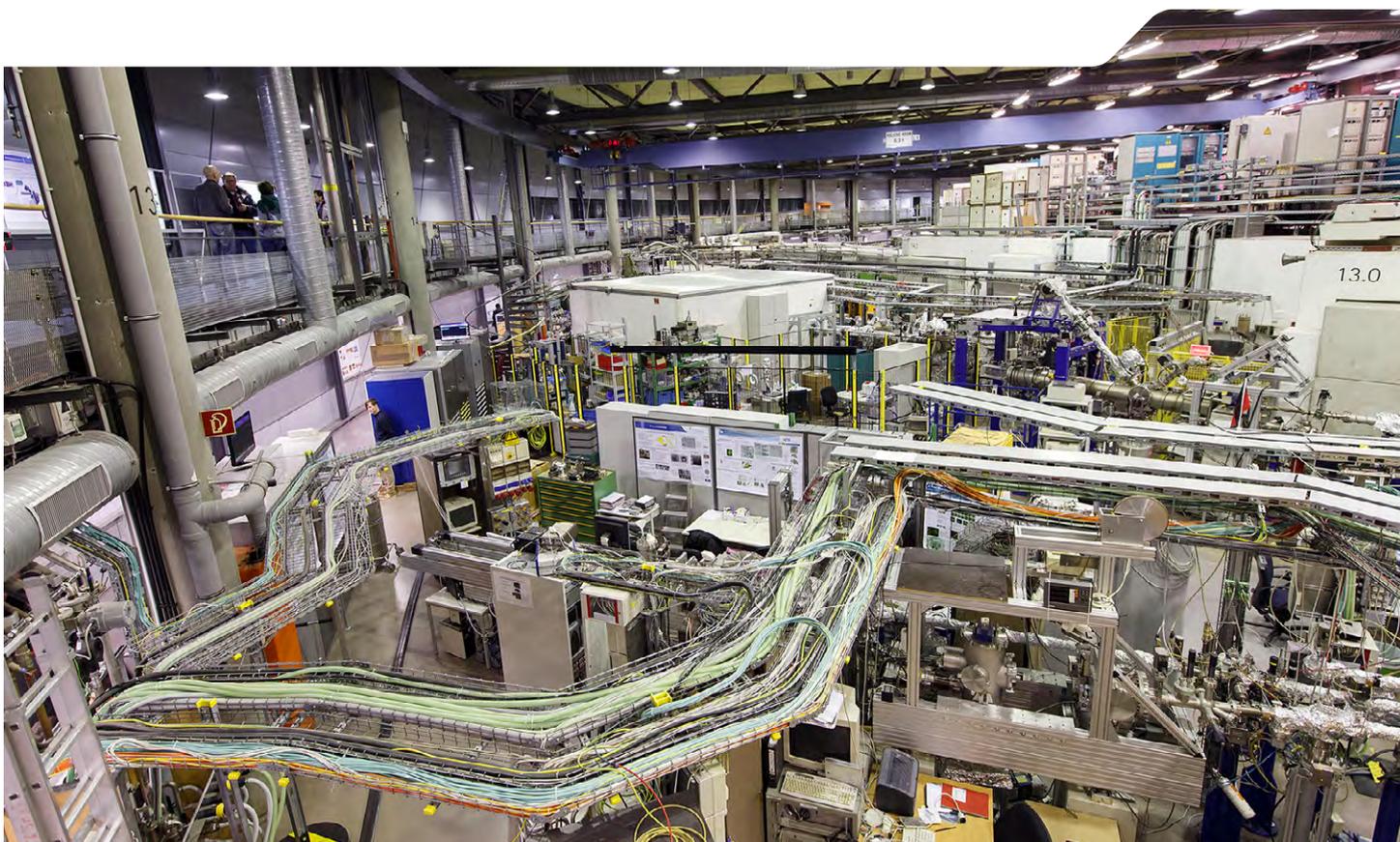
BESSY II: Die vom HZB betriebene Synchrotronstrahlungsquelle BESSY II ist eine weltweit hoch anerkannte Quelle für extrem brillante weiche und mittlere Röntgenstrahlung. Der Nutzergemeinde stehen an BESSY II einzigartige Instrumente für hochauflösende Spektroskopie, Mikroskopie und zeitaufgelöste Experimente sowie innovative Probenumgebungen für *in situ*- und *operando*-Messungen zur Verfügung. Schwerpunkt der Nutzung von BESSY II ist die Materialforschung – von den Grundlagen bis zur Anwendung – für die großen gesellschaftlichen Herausforderungen wie nachhaltige Energieversorgung, Quantentechnologie, energieeffiziente Informationstechnologie und Gesundheit. BESSY II hat mit seinen 37 Experimentierstationen im internationalen Vergleich eine herausragende Produktivität.

PETRA III: Die von DESY betriebene, hochenergetische Synchrotronstrahlungsquelle PETRA III ist eine der brillantesten Speicherring-Röntgenstrahlungsquellen der Welt. Als eine der leistungsstärksten Lichtquellen ihrer Art bietet sie den Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler exzellente Experimentiermöglichkeiten mit Röntgenstrahlung besonders hoher Brillanz über einen weiten Photonenenergiebereich von mit Hauptanwendungsbereichen im mittleren bis harten Röntgenbereich mit bis zu über 200 keV Photonenenergie. Davon profitieren vor allem Forscher, die sehr kleine Proben untersuchen wollen oder stark gebündeltes, sehr kurz-

welliges Röntgenlicht für ihre Analysen benötigen. Damit ist es möglich Materialien mit einer räumlichen Auflösung im subµm-Bereich orts aufgelöst mit einer Vielzahl verschiedener Techniken zu charakterisieren. Die hochenergetische Strahlung ermöglicht es zudem komplexe Probenumgebungen für *in situ* oder *operando* Studien unter relevanten Prozess- oder Betriebsbedingungen zu nutzen oder das Innere von Proben oder kompletten Werkstücken zu analysieren. Im Endausbau werden an PETRA III 27 Strahlführungen mit mehr als 60 Experimentierstationen realisiert sein.

Karlsruhe Research Accelerator (KARA): Der Elektronenspeicherring KARA am KIT dient zur Entwicklung neuer Beschleunigertechnologien und als Synchrotronstrahlungsquelle. An KARA werden verschiedene Beamlines und Labore betrieben, die u.a. zur *in situ*, *in vivo*- und *in operando*-Charakterisierung von Materialien, Nanostrukturen sowie biologischen Prozessen genutzt werden.

Freie-Elektronen-Laser (FLASH): Seit 2005 erzeugt FLASH, der weltweit erste Freie-Elektronen-Laser im weichen Röntgenbereich, bei DESY in Hamburg extrem intensive, ultrakurz gepulste Röntgenlaserblitze. Die extrem kurzen Pulse im 10 fs Bereich ermöglichen es, ultraschnelle Prozesse oder Nichtgleichgewichtszustände in Materie zu untersuchen. Damit ist es beispielsweise mögliche atomar aufgelöst Reaktionspfade aufzuschlüsseln. Bedingt durch den Energiebereich von FLASH kommen hier hauptsächlich spektroskopische Messmethoden zum Einsatz. Durch die in diesem Photonenenergiebereich weltweit einzigartige, hohe Pulswiederholrate können auch stark verdünnte Probensysteme oder solche mit einem extrem kleinen, aber hochpräzisen Nutzsignal untersucht werden. Die Erkenntnisse aus derartigen Experimenten erweitern unser grundsätzliches Verständnis von Struktur und Dynamik von Materie auf der atomaren Skala und können genutzt werden, um neue Werkstoffe, z.B. für katalytische Prozesse, und Medikamente zu entwickeln.



European XFEL: Der European XFEL erzeugt ultrakurze Laserlichtblitze im Röntgenbereich. XFEL ermöglicht Untersuchungen in einem einzigartigen und breiten Anwendungsbereich. Wie bei FLASH ermöglichen die extrem kurzen Pulse die Untersuchungen von dynamischen Vorgängen auf Zeitskalen bis unter 10 fs. Damit liegen der Hauptanwendungsbereich des European XFEL in der Untersuchung ultraschneller Prozesse, die mit traditionellen Synchrotronstrahlungsquellen nicht untersucht werden können. Bedingt durch die höheren Photonenenergien am European XFEL im Vergleich zu FLASH ist man hier in der Lage, über diffraktive Experimente gleichzeitig zeitlich und räumlich in atomaren Dimensionen vorzustoßen. So helfen detaillierte Bilder von Zellbestandteilen, einzelnen Eiweißmolekülen und Viren und deren dynamisches Verhalten bei der Krankheitsbekämpfung und dem gezielten Design von Medikamenten. Der mit dem XFEL mögliche Zugang zum genauen Aufbau von Nanomaterialien und deren atomarer Dynamik ermöglicht die Entwicklung neuartiger, funktionaler Werkstoffe für die Zukunft, etwa für effektivere Solarmodule und Brennstoffzellen sowie für künftige Datenspeicher.

Materialforschung mit Neutronen: Die Erforschung von Materie mit Neutronen an weltweit führenden Quellen, u.a. an ESS (Inbetriebnahme 2023), ILL, SNS und FRM II, wird über die Nutzerplattformen „*Jülich Centre for Neutron Science*“ (JCNS, am FZJ) und „*German Engineering Materials Science Centre*“ (GEMS, am HZG) organisiert. Das JCNS nutzt Neutronen als mikroskopische Sonden, um kondensierte und biologische Materie zu erforschen, baut und betreibt hierzu Neutronenstreuinstrumente und stellt diese an führenden Neutronenquellen einer großen Nutzergemeinde zur Verfügung. Eine Schlüsselrolle spielt dabei das Heinz Maier-Leibnitz-Zentrum (MLZ) als die nationale Nutzereinrichtung.

German Engineering Materials Science Centre (GEMS): das HZG betreibt mit GEMS Instrumentierung für die Untersuchung von Werkstoffen mit Synchrotronstrahlung (bei PETRA III, DESY) und Neutronen (am MLZ). Die Instrumente werden dazu auch explizit externen Nutzern aus Hochschulen, anderen Forschungseinrichtungen und Industrie für Ihre Arbeiten mit Fokus auf *in situ*-Experimenten zur Verfügung gestellt.

Ion Beam Center (IBC): das IBC des HZDR befasst sich mit der Modifikation und Analyse von Materialien, insbesondere von dünnen Schichten und Oberflächen, unter Verwendung von Ionen in einem weiten Energiebereich (eV bis MeV). Im Fokus stehen u.a. neuartige 2D-Materialien, Dotierung und Defekte in Halbleitern, magnetische Filme, Synthese neuer Phasen sowie Analytik mit einer Vielzahl von Ionentechniken. Auch eine Nanofabrication Facility mit Reinraum ist Teil des IBC.

GSI/FAIR-Anlagen: an den GSI-Beschleunigeranlagen werden hochenergetische Ionenstrahlen (MeV-TeV) genutzt, um an speziell für Materialforschung ausgelegten Strahlzweigen mikroskopische und makroskopische Wechselwirkungsprozesse mit Materie zu untersuchen, Nanostrukturen herzustellen und die Strahlungshärte von Materialien und Komponenten zu testen. Experimente in der Atom-, Bio- und Plasmaphysik wie auch in der Materialforschung werden an den gegenwärtigen Beschleuniger- und Speicherringanlagen der GSI (UNILAC, SIS18, ESR mit CRYRING und HITRAP) durchgeführt. In den kommenden Jahren werden zudem Experimentierplätze an den FAIR-Beschleunigeranlagen zur Verfügung stehen, die u.a. die Möglichkeit bieten, das Verhalten von Materialien unter mehrfach Extrembedingungen (Teilchen- und Laserstrahlung, hoher Druck und Temperatur) zu erforschen.

Hochfeld-Magnetlabor Dresden (HLD): das HLD am HZDR betreibt moderne Materialforschung in hohen Magnetfeldern. Experimente in hohen Feldern bieten Forschern einmalige Möglichkeiten, grundlegende Erkenntnisse über die uns umgebende Materie zu erlangen, denn sie erlauben in einzigartiger Weise, Materialeigenschaften gezielt und vor allem kontrolliert zu beeinflussen. In erster Linie werden elektronische Eigenschaften metallischer, halbleitender, supraleitender und magnetischer Materialien untersucht. Besondere Beachtung finden dabei exotische Supraleiter, stark korrelierte Elektronensysteme, niederdimensionale und frustrierte Spinsysteme und nanostrukturierte Materialien.

Elektronen Linearbeschleuniger für Strahlen hoher Brillanz und niedriger Emittanz (ELBE): mit der Strahlungsquelle ELBE am HZDR werden verschiedene Arten von Sekundärstrahlen – sowohl elektromagnetische Strahlung als auch Teilchen – erzeugt. Hochintensive kohärente Infrarot- und THz-Strahlung wird zur nicht-linearen und zeitaufgelösten Spektroskopie als auch Mikroskopie von Materialien eingesetzt. Positronen ermöglichen die Analyse von Defekten, insbesondere Leerstellen und kleinen Hohlräumen in verschiedensten Materialien.

Höchstfeld NMR-Spektroskopie: Mittels Lösungs- und Festkörper NMR-Spektroskopie am HMGU, FZJ und KIT werden biologische Materialstrukturen, wie z.B. Amyloidfibrillen, die Selbstassemblierung makroskopischer Strukturen durch flüssig/flüssig Phasenseparation (LLPS), sowie Nanocarrier und Trägersysteme *in vitro* mit nahezu atomarer Auflösung untersucht. Es können biologische Strukturen insbesondere auch die Schnittflächen zwischen anorganischen und biologischen Materialien in nativem Zustand (ohne chemische Modifizierung) untersucht werden. Im Festkörper kann die Empfindlichkeit durch Übertragung der Magnetisierung von Elektronen auf Kernspins mittels DNP (dynamic nuclear polarization) enorme Empfindlichkeitssteigerungen erzielen.

Ernst Ruska-Zentrum für Mikroskopie und Spektroskopie mit Elektronen (ER-C): Für die Charakterisierung neuartiger Materialien und Bauteile bietet das ER-C des FZJ der (inter-)nationalen wissenschaftlichen Gemeinschaft mehrere Transmissionselektronenmikroskope der höchsten Leistungsklasse. Für das ER-C 2.0 werden in den nächsten Jahren fünf neuartige Geräte der nächsten Generation und höchsten Leistungsklasse angeschafft, die in koordinierter Weise den Nutzerbetrieb von klassischen Festkörpern über Nanomaterialien und weiche Materie bis hin zu Biomolekülen und Zellstrukturen abdecken.

Karlsruhe Nano Micro Facility (KNMF): Die KNMF am KIT ist eine Forschungsinfrastruktur der Helmholtz-Gemeinschaft zur Charakterisierung funktionaler Materialien, Komponenten und Systeme auf der Mikro- und Nanoskala. Seit 2008 ermöglicht diese Einrichtung Nutzern aus der akademischen Welt und der Industrie Zugang zu hochentwickelter und einzigartiger Technologie und Ausstattung sowie zu Prozessketten, die für die Werkstofftechnik und in der Entwicklung von Informationssystemen notwendig sind. Die Expertise der

Forscher an der KNMF hilft den Nutzern bei der Lösung ihrer anwendungsorientierten Probleme. Dies macht die KNMF zu einer Plattform für die Zusammenarbeit zwischen Nutzern und KIT-Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler, die so die großen Herausforderungen im Bereich Information angehen können. Für die PoF IV wird diese zur KNMF for information (KNMFi) umstrukturiert und um den Fokus digitale Materialanalyse ergänzt.

Energy Materials In-situ Laboratory (EMIL@BESSY II): EMIL ist eine weltweit einzigartige Laborinfrastruktur an der Synchrotron-Lichtquelle BESSY II. Sie dient der Röntgenanalyse des Wachstums und der Eigenschaften von Energiematerialien in Echtzeit (*in situ*) und in voller Funktionalität (*in operando*) und legt den Grundstein für eine detaillierte Optimierung von Materialien und Strukturen zur Energieumwandlung. EMIL umfasst analytische und industrierelevante Depositionsanlagen in einem integrierten Ultrahochvakuumsystem, das eine schnelle Schicht für Schicht Deposition und Charakterisierung ermöglicht. Beteiligt sind das HZB und die Max-Planck-Institute Fritz-Haber-Institut (FHI) und Chemische Energiekonversion (CEC).

Center for X-ray and Nanoscience (CXNS): Das CXNS ist ein interdisziplinäres Zentrum für die Forschung mit Röntgenlicht zur Lösung von Fragestellungen in den mit Material- und Nanowissenschaften. Forschungsthemen wie die Untersuchung optimierter Materialien für Energieumwandlungsprozesse und Transport, Sensortechnologie, abbildende Röntgenverfahren oder Rastersondenmikroskopie und Nanostrukturierung werden unter dem Dach des CXNS gebündelt. Das CXNS ist ein Kooperationsprojekt von DESY, das gemeinsam mit dem HZG, der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel (CAU), dem Leibniz-Institut für Kristallzüchtung (IKZ) und der Technischen Universität Hamburg (TUHH) betrieben wird.

Helmholtz Energy Materials Characterization Platform (HEMCP): Die Forschungsplattform mit zentralem Zugang bietet analytische Methoden zur Charakterisierung von Energiematerialien in 4D sowie *in situ*-Informationen zu strukturellen, elektrischen und chemischen Eigenschaften. HEMCP vereint eine einzigartige Sammlung von Geräten und Analysemethoden aus sieben Forschungseinrichtungen (FZJ, DESY, DLR, HZB, HZDR, HZG, KIT) unter einem virtuellen Dach und bietet damit vielfältige Möglichkeiten für Forschungsfragen zu Materialien für Energietechnologien.

VIRTUALISIERUNG UND SIMULATION VON MATERIALIEN

Ein wesentliches Ziel ist die Entwicklung von Strategien zur Virtualisierung von Materialien und der Materialentwicklung auf Basis eines modell- und datenbasierten Materialdesigns. Hierbei treten generische Fragestel-

lungen, insbesondere im Hinblick auf die *Digitalisierung* der Materialwissenschaft auf, die nur programmübergreifend adressiert werden können. Zwei wesentliche Aspekte der *Digitalisierung* sind die Virtualisierung der Materialentwicklung, d.h. die Bereitstellung von Methoden und Werkzeugen zum rechnergestützten Design von Materialien sowie die umfassende Erfassung und Nutzung von Materialdaten in Bezug auf Zusammensetzung und Mikrostruktur, Eigenschaften und Herstellung sowie der nutzungsbedingten Veränderungen. Hierzu tragen unter anderem die Aktivitäten der Querschnittsaktivität des FB Information „*Virtual Materials Design*“ durch die Entwicklung und Validierung von neuen Methoden zur computergestützten Material- und Prozessentwicklung bei. Diese etabliert in Helmholtz damit den Ankerpunkt zur Entwicklung neuer Materialien, in dem das Konzept des „*digitalen Zwillings*“ weiterentwickelt wird und eine breite Nutzung ermöglicht wird. Dadurch wird zu technologieorientierten Materialentwicklungen in der Helmholtz-Gemeinschaft beigetragen.

Die komplementäre Expertise aus allen FB und die durch eine gemeinsame Herangehensweise für das Materialdesign gewonnenen Forschungsergebnisse werden für unterschiedlichste Anwendungsbereiche genutzt. Hierzu entwickeln wir eine skalenübergreifende Modellierungsplattform unter Einbeziehung von hochperformanten, nutzerfreundlichen Simulationsverfahren und datengetriebenen Ansätzen. Wichtige Ziele hierbei sind die Entwicklung einer virtuellen Forschungsumgebung zur Umsetzung skalenübergreifender Simulationsverfahren und zum Austausch von Daten, Methoden und Software für virtuelles Materialdesign. Die schließt auch die Entwicklung verbesserter und hardwarenaher Algorithmen und die Nutzung der HGF Infrastrukturen ein:



Supercomputing Facility (JSC): Das FZJ hat seine Stellung als führendes europäisches Kompetenzzentrum für Tier-0/1-Höchstleistungsrechnen ausgebaut. Es treibt die Technologieentwicklung im Exascale Computing, erschließt mit Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus den unterschiedlichsten naturwissenschaftlich-technischen Disziplinen neue Möglichkeiten des Erkenntnisgewinns durch Co-Design von Rechner-technologie und Applikation und betreut verschiedene e-Infrastrukturen für die internationale Gemeinschaft. Es betreibt einen modular aufgebauten Supercomputer der höchsten Leistungsklasse. Es wird dieses Konzept in die Exascale-Leistungsstufe überführen und zudem mit fortschrittlichen modularen (Post-von-Neumann) Architekturen kombinieren, die unterschiedliche Technologien (insbesondere neuromorphe und Quanteneffekte nutzende Komponenten) integrieren. In diesem Zusammenhang ist zurzeit die Entwicklung eines offenen Innovation Hubs für Forschung im Bereich der Quanten-Annealing und des Quanten-Computing vorgesehen.

Helmholtz Data Federation (HDF): Mit der HDF wird in Deutschland eine bundesweite, föderierte Forschungsdateninfrastruktur entwickelt, die offen für das gesamte nationale Wissenschaftssystem ist. Ein initialer Satz von wissenschaftlichen Anwendungsfällen deckt einen Großteil der Forschungsdisziplinen in den Helmholtz Forschungsbereichen ab. Die HDF repräsentiert einen nationalen Baustein zur Realisierung einer europäischen, offenen Wissenschafts-Cloud (European Open Science Cloud, EOSC). Im Jahr 2017 gestartet, umfasst die HDF drei Elemente: innovative Software-Technologien zum Forschungsdatenmanagement, exzellente Unterstützung und gemeinsame Forschung mit Nutzern, hochmoderne Speicher- und Analyse-Hardware. Partner sind KIT (Koordinator), AWI, DESY, DKFZ, FZJ und GSI.

Large Scale Data Facility (LSDF): Seit 2010 betreibt das KIT die LSDF – eine Infrastruktur, die Datenspeicher-, Archivierungs- und Analyse-Kapazitäten für eine Vielzahl der am KIT und in Baden-Württemberg betriebenen wissenschaftlichen Forschung bereitstellt (z. B. Hydromechanik, Strukturbiologie, Astrophysik). Die LSDF ist an den Tier-2 Supercomputer ForHLR am KIT angebunden, um daten-intensives Rechnen effizient zu ermöglichen. Insgesamt sind rund 10 PB Kapazität zur Speicherung und Archivierung von Forschungsdaten verfügbar.

High-Performance-Computing-Systeme (HPC): Das KIT betreibt innovative HPC-Systeme für das sog. Capability und Capacity Computing. Für effizientes daten-intensives Rechnen und Smart-Data-Analysen sind diese eng mit der LSDF verbunden. Der Supercomputer ForHLR ist ein Tier-2-Supercomputer mit 1,4 PetaFlop/s Leistung; er verwendet ein innovatives, energieeffizientes Warmwasser-Kühlungskonzept, das jüngst mit dem Deutschen Rechenzentrumspreis 2017 ausgezeichnet wurde. Ergänzend kommt ab Herbst 2020 der Supercomputer HoreKa hinzu.

Interdisciplinary Data and Analysis Facility (IDAF): Das DESY betreibt ein sehr großes System zur Simulation sowie der Analyse, Speicherung und Archivierung von großen Datenmengen. Dieses System mit mehr als 60.000 Cores neuester Technologie und unterstützt von GPGPU Spezialprozessoren ist an eine umfangreiche mehrstufige Speicherstruktur angeschlossen, die die hochperformante Analyse von Experimentdaten an PETRA III und FLASH erlaubt. DESY ist ein Partner der HDF und wirkt aktiv durch eine Vielzahl von Projekten an der Entwicklung moderner Cloud-Konzepte für die Communities mit. Zur Analyse vor allem korrelativer Daten sollen in Zukunft verstärkt Methoden der künstlichen Intelligenz eingesetzt werden.

VI. FORSCHUNGSINFRASTRUKTUREN UND GROSSGERÄTE

ZUKÜNFTIGE FORSCHUNGSINFRASTRUKTUREN

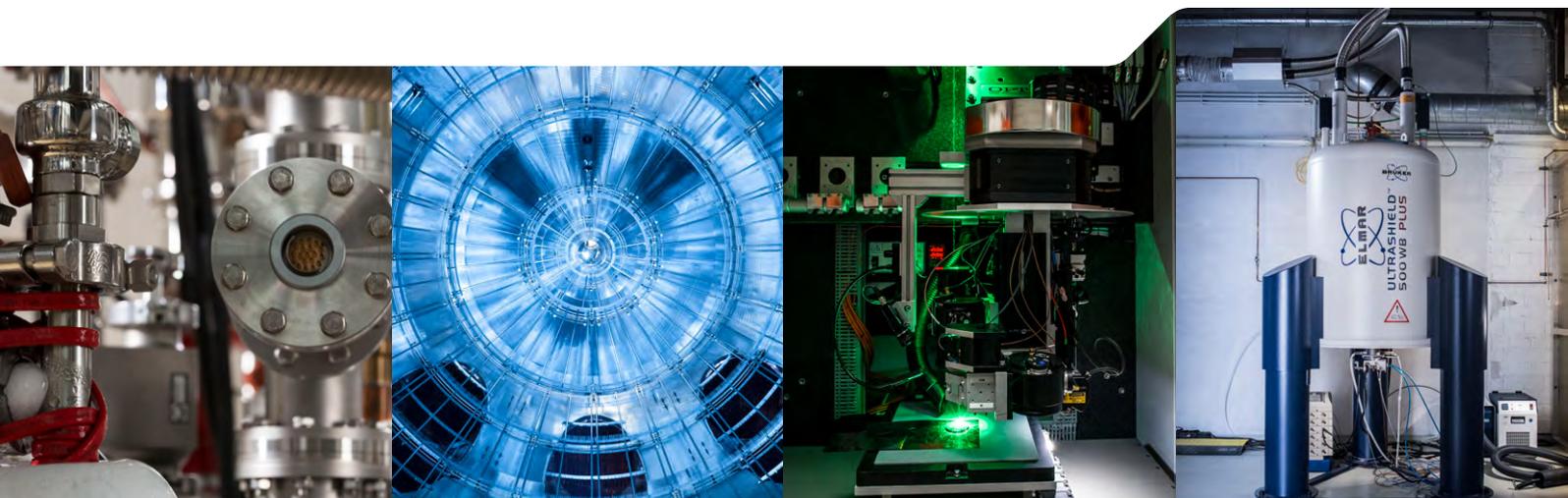
Bei der Bewältigung der globalen gesellschaftlichen Herausforderungen spielen Großforschungsinfrastrukturen wie Beschleuniger- und Experimentieranlagen, sowie Höchstleistungsrechner eine wichtige Rolle für den wissenschaftlichen Fortschritt. Die Entwicklung, der Bau und Betrieb sind eines der wichtigen Kernelemente in der Mission der Helmholtz-Gemeinschaft und bieten damit dem Wissenschaftsstandort Deutschland einen einzigartigen Vorteil. Die internationale Sichtbarkeit wird durch einen entsprechenden Nutzerbetrieb für nationale und internationale Forscherinnen und Forscher noch erhöht.

Die Helmholtz-Gemeinschaft erarbeitet zurzeit die Helmholtz Roadmap für Ausbauinvestitionen in große Forschungsinfrastrukturen für die kommenden zehn Jahre. Die in der Planungsphase befindlichen und für die Materialforschung relevanten Großforschungsinfrastrukturen werden hier aufgelistet. Dazu gehören Beschleuniger von Photonen und Elektronen für die Erzeugung von Neutronen, Dateninfrastrukturen, Charakterisierungsmethoden wie die Elektronenmikroskopie und die NMR-Technologie als neuen Schwerpunkt aber auch dezidierte Anwendungslabore.

Die Liste der geplanten Großforschungsinfrastrukturen im Folgenden, aber auch die Planungen in den beteiligten Helmholtz-Zentren für die Forschungsinfrastruktur allgemein zeigen, dass die Herausforderungen der modernen Materialwissenschaft eine stetige Weiterentwicklung der Forschungsanlagen und Großgeräte erfordern. Auf der einen Seite werden die Auflösungsgrenzen zu immer kleineren Dimensionen und Zeitinkrementen verschoben während auf der anderen Seite immer größer werdende Materialsysteme unter realen Bedingungen charakterisiert

werden können. Diese Trends sind gleichzeitig mit immer größer werdenden Datenmengen verbunden, die es gilt effizient zu analysieren und zu speichern. Die geplanten Forschungsinfrastrukturen schaffen entsprechende Voraussetzungen und erhalten somit die Leistungsfähigkeit und Spitzenstellung der Materialforschung der Helmholtz-Gemeinschaft. Ein wesentlicher Baustein ist hierbei auch der umfassende Nutzerbetrieb, den die Helmholtz-Zentren für die nationale und internationale Materialforschungsgemeinschaft ermöglichen.

PETRA IV: Das PETRA IV-Projekt bei DESY umfasst den Ausbau der Synchrotronstrahlungsquelle PETRA III zu einer Quelle mit ultrakleiner Emittanz, die im Photonenenergiebereich bis 10 keV die physikalischen Grenzen der Fokussierbarkeit von Synchrotronstrahlung erreichen soll. (diffraktionslimitierte Strahlung). Der Hauptanwendungsbereich von PETRA IV wird wie bei PETRA III im harten Röntgenenergiebereich liegen. Mit den angestrebten Strahleigenschaften wird PETRA IV zum ultimativen Röntgenmikroskop für biologische, chemische und physikalische Prozesse unter realistischen *in situ-/in operando*-Bedingungen, und ermöglicht deren Untersuchung auf Längenskalen von atomaren Dimensionen bis zu Millimetern und prozessrelevanten Zeitskalen. Damit werden neue bahnbrechende Untersuchungen in vielen Bereichen von Wissenschaft und Industrie, von der Grundlagenforschung bis zu industriellen Anwendungen, ermöglicht. Wichtige Beiträge zu den großen gesellschaftlichen Herausforderungen in Gesundheit, Energie, Erde und Umwelt, Verkehr und Informationstechnologie werden so geleistet. Die analytischen Fähigkeiten von PETRA IV sind für die Entwicklung neuartiger, auf der Nano- oder atomaren Skala strukturierter Materialien mit maßgeschneiderten Funktionen unerlässlich.



BESSY III: Die Synchrotronstrahlungsquelle BESSY III ermöglicht mit ihrem Schwerpunkt auf spektroskopischen Methoden die Realisierung und Optimierung von hochstefizienten Materialien und Systemen zur Umwandlung, Speicherung und Nutzung von Energie sowie für energieeffiziente Informationstechnologien. Als Quelle der nächsten Generation erlaubt BESSY III einzigartige Einblicke in die Wechselwirkung von Licht mit Materie, den Transport von Elektronen und Ionen durch Grenzflächen sowie katalytisch unterstützte chemische Reaktionen. In Kombination mit dedizierten Probenumgebungen gestattet BESSY III *in situ/in operando*-Untersuchungen von der Nano- bis zur Makrodimension und von extrem kurzen Zeitskalen bis zu stationären Zuständen. Als führende Anlage für weiche Röntgenstrahlung in Europa wird BESSY III am Technologie-Campus Adlershof einzigartige Möglichkeiten für Forschung und Industrie im Wissenschafts- und Hochtechnologiestandort Deutschland schaffen.

FLASH2020+: Beim FLASH2020+ - Projekt handelt es sich um die Modernisierung des bestehenden FLASH FELs im weichen Röntgenbereich im Hinblick auf eine bessere und schnellere Durchstimmbarkeit der Photonenenergie sowie auf besser definierte spektrale Eigenschaften der Photonenpulse. Als FELs im weichen Röntgenbereich sind die beiden FLASH FELs prädestiniert zur Untersuchung von elektronischen sowie magnetischen Eigenschaften auf ultrakurzen Zeitskalen im Bereich bis unter 10 fs. Beispiele hierfür sind schnell ablaufende chemische Reaktionen oder Nichtgleichgewichtszustände. Die durch die Nutzung eines supraleitenden Linearbeschleunigers möglichen hohe Pulswiederholrate erlauben es zudem auch, hoch verdünnte Systeme oder solche mit einem extrem kleinen Nutzsignal zu analysieren.

Dresden Advanced Light Infrastructure (DALI): Die auf supraleitenden Elektronenbeschleunigern basierende Strahlungsquelle DALI umfasst die weltweit einzigartige Kombination aus einer Hochfeld-Strahlungsquelle für den Terahertz (THz)-Spektralbereich und das Mittlere Infrarot sowie einem Freie-Elektronenlaser für Wellenlängen im Vakuum-Ultraviolett (VUV). Als Nachfolger der Strahlungsquelle ELBE erlauben diese Quellen die experimentelle Untersuchung dynamischer Prozesse mit Femtosekunden-Zeitauflösung bei extrem hohen Pulsenergien und Wiederholraten. In Kombination mit Positronen-Sekundärstrahlung, einem System für ultraschnelle Elektronbeugung sowie speziellen Nutzerlabors für Physik, Materialwissenschaft, Chemie, Biologie und Medizin schafft DALI die Voraussetzungen für exzellente Spitzenforschung durch nationale und internationale Nutzergruppen aus unterschiedlichen wissenschaftlichen Disziplinen.

High Brilliance Neutron Source (HBS): Die Entwicklung der hochbrillianten, beschleunigergetriebenen Neutronenquelle HBS) dient der Realisierung der nächsten Generation von Neutronenquellen in Deutschland und weltweit. Das Projekt wird am Forschungszentrum Jülich voran getrieben mit dem Ziel, eine Prototyp-Anlage bis 2028 zur Verfügung zu stellen. Mit ihren intensiven gebündelten Neutronenstrahlen wird die HBS dazu beitragen, in der Neutronenanalytik die räumliche Struktur und ihre Dynamik an nanostrukturieren oder biologischen Materialien zu erschließen, um neue Materialien und Funktionalitäten in Bereichen von Quantenmaterialien bis zu Energiespeichern zu entwickeln. Durch spezielle Targetstationen und Instrumente ergänzt die HBS zukünftig große internationale Anlagen wie die Europäische Spallationsquelle ESS und bietet als nationale Neutronenquelle Nutzern einen nachhaltigen Zugang zu Neutronen.

ACcelerator-Driven multipurpose ion beam Complex (ACDC): Mit dem ACDC werden die in Deutschland verfügbaren Ionenenergien ausgebaut und damit die derzeit vorhandene Lücke zwischen dem HZDR (niedrige Energien) und der GSI (höchste Energien) geschlossen. Die Erweiterung der verfügbaren Ionenenergien und die Bereitstellung von Neutronen mit ACDC stärkt den Fokus auf wichtige Fragen der Gesellschaft: mit der Etablierung der unikalen Hochenergie-Beschleunigermassenspektrometrie werden aktuelle Fragen des Klimawandels und des Umweltschutzes adressiert. Darüber hinaus wird das Forschungsportfolio um den Bereich der Strahlenbiologie ergänzt und bei Nutzung einer Ionennachbeschleunigung auf die Strahlenmedizin ausgedehnt. Im Bereich der Materialforschung werden damit neue Verfahren für verlustarme Hochleistungsbauelemente für die Elektromobilität und intelligente Netze weiterentwickelt.

Die **Karlsruhe Nuclear Magnetic Resonance Facility (KNMR)** wird ein Inkubator für neuartige und herausragende Materialforschung sein, um die Abbildung und Bearbeitung entlang der gesamten NMR-Wertschöpfung zu ermöglichen. Hierbei stehen die Weiterentwicklung der Gerätetechnologie und Methodik sowie die korrelative Charakterisierungsmethodik mit Auswerte-Algorithmen und *in situ/operando*-Techniken für die Lebenswissenschaften im Fokus. Die KNMR dient als Kooperationsplattform und Nutzerbetrieb der Industrie und Wissenschaft gleichermaßen. Für die *Digitalisierung* der Materialwissenschaft wird die KNMR in der nationalen und internationalen Forschungslandschaft einen wichtigen Beitrag leisten können und diese langfristig prägen.

VI. FORSCHUNGSINFRASTRUKTUREN UND GROSSGERÄTE

Mit dem **ER-C 2.0** wird eine nationale Forschungsinfrastruktur für hochauflösende Elektronenmikroskopie im Ernst Ruska-Centrum (ER-C) am Forschungszentrum Jülich aufgebaut. Durch neuartige, international richtungsweisende Geräte der nächsten Generation, die den Nutzerbetrieb von den klassischen Festkörpern über Nanomaterialien und weiche Materie bis hin zu Biomolekülen und Zellstrukturen abdecken, wird das ER-C zu einer einzigartigen Infrastruktur für die hochauflösende Charakterisierung atomarer und molekularer Strukturen weiterentwickelt. Der Aufbau eines modernen Datenmanagement-Systems ist ein integraler Bestandteil des Konzepts und soll sowohl die Aspekte der Datensicherheit, der Sicherung der Regeln guter wissenschaftlicher Praxis und der Generierung transferierbarer Metadaten als auch die Möglichkeit zur nachträglichen Auswertung der Messergebnisse von unabhängigen Expertengruppen umfassen.

Die **International Fusion Materials Irradiation Facility - Demo Oriented NEutron Source (IFMIF-DONES)** ist eine auf einer beschleunigergetriebenen Neutronenquelle basierende Forschungsinfrastruktur zur Simulation des Neutronenspektrums in einem Fusionsreaktor und dessen Auswirkungen auf die verwendeten Materialien. Damit sollen diese Materialien für den ersten Fusionsdemonstrationsreaktor DEMO charakterisiert, validiert und qualifiziert werden. IFMIF-DONES wurde 2018 in die europäische ES-FRI-Roadmap aufgenommen; vorbereitende Arbeiten sind in Granada, Spanien, bereits im Gange. Synergien sind z.B. mit medizinischen Beschleunigeranwendungen möglich, sowie hinsichtlich Wasserstoffdiffusion durch geschädigte Materialien. Die Realisierung der Anlage bringt wertvolle Daten zu Flüssigmetallkorrosion und -erosion von Strukturmaterialien, die für Hochtemperaturspeicherprozesse relevant sind. KIT wird u.a. sein Fusionsmateriallabor für die notwendigen Nachuntersuchungen mit skalenübergreifenden Charakterisierungs- und Modellierungsmethoden einbringen und so seine Spitzenstellung bei der Entwicklung & Qualifizierung von Energiematerialien langfristig international sichern (Aufbau ca. 10 Jahre mit ca. 30 Jahre Betrieb). Damit ergeben sich direkte Synergien zum Programm MTET, Topic 4 (HT3: Gasturbine, konzentrierende Solarthermie, thermische Speicher) und Topic 3 (Chem. Energy Carriers). Darüber hinaus stärkt dieses Engagement die Zusammenarbeit mit der deutschen Industrie.

In-Situ Innovation Platform for Multifunctional Materials Systems (InnoMatSy): Das HZG plant eine *In-situ*-Innovationsplattform für multifunktionale Materialsysteme. Zusammen mit anderen Zentren wird InnoMatSy eine material-, funktions- und anwendungsübergreifende Charakterisierungsinfrastruktur kombiniert mit Datenspeicher, Big-Data-Strategien und Software-Tools bilden. Im Sinne einer Machbarkeitsstudie wird InnoMatSy zur Aufklärung von Veränderungen der Stoffwechselfunktionen in der Umgebung abbaubarer metallischer Implantate im lebenden Organismus genutzt werden. Dies soll langfristig und unter Einbeziehung weiterer Zentren zur Verbesserung der Verbindung von *in situ*- und *operando*-Prozessprobenumgebungen in Labors mit Synchrotronstrahlung, Neutronen, Elektronenmikroskopie und Kernresonanzspektroskopie mit Computersimulationen genutzt werden. Diese innovative Plattform für systematisch integrierte und multifunktionale Materialsysteme wird die modell- und simulationsbasierte Entwicklung von Materialsystemen erheblich beschleunigen und vor allem die Validierung von Dynamic Digital Twins, die den laufenden Prozess während der Verarbeitung und Anwendung der Materialien beschreiben, erlauben.

4D-CAT – Bridging the innovation gap in catalyst research for electro-, photo- and thermocatalysis: Elektro-, photo- und thermo-katalytisch wirksame Funktionsmaterialien sind essenzielle Elemente von effizienten Prozessketten der Energiewende für die Herstellung von chemischen Zwischenprodukten und hochwertigen Energieträgern. Power-to-X-Prozesstechnologien, in denen CO₂ katalytisch als C-Quelle für die Herstellung von Basischemikalien und synthetischen Kraftstoffen genutzt wird, die Elektrifizierung chemischer Synthesen und die Entwicklung photokatalytischer Synthesen sind die zentralen Treiber neuer Technologien zur Schließung von Materialkreisläufen. Für die Katalyse resultiert die Notwendigkeit, Innovationszyklen vom Materialdesign hin zur industriellen Anwendung zu beschleunigen. Diese Notwendigkeit adressiert die geplante Infrastruktur 4D-CAT über die 4 Dimensionen „*Design from Nano to Makro*“, „*Operando*“, „*Theory*“ und „*Lab to Fab*“.

CeRI²: In der Hightech-Strategie der Bundesregierung wie auch der Rohstoffinitiative der EU spielt die ressourceneffiziente Kreislaufwirtschaft eine herausgehobene Rolle. Energieeffiziente Ressourcentechnologien sind hierfür ein Schlüsselement. Diese Technologien nutzen oft turbulente Mehrphasenströmungen für die Wertstoffgewinnung. Zentrale Prozesse in solchen Mehrphasenströmungen wie das Anhaften von Wertstoff-Partikeln an Blasen sind nach wie vor weitgehend unverstanden. Die optische Intransparenz derartiger Mehrphasenströmungen mit hohem Feststoff- und Gasgehalt lässt kaum Messungen mit klassischen Techniken zu. An beiden Problemen setzt CeRI² an. Es untersucht die für die Wertstoffgewinnung relevanten mikro- und mesoskopischen Längenskalen von Mehrphasenströmungen. Es entwickelt Messtechnik für diese Strömungen und Werkzeuge für die Intensivierung von Prozessen. Für die Prozessoptimierung wird stark auf die Einbeziehung von Methoden der Künstlichen Intelligenz gesetzt.

FlexiPlant: Der Aufbau einer nachhaltigen Kreislaufwirtschaft bedingt ein völlig neuartiges Herangehen bei der Verarbeitung von Rohstoffen. Technologien müssen in der Lage sein, komplexe Rohstoffe mit höchster Effizienz zu verarbeiten. Dies kann nur durch konsequente *Digitalisierung* und Vernetzung adaptiver und flexibler Ressourcentechnologien erreicht werden. Forschung an solchen Technologien erfolgt in Europa bisher im labor- und kleintechnischen Maßstab. Es existiert keine Forschungsinfrastruktur, die es ermöglicht, die Technologien im Pilotmaßstab zu testen – und gleichzeitig ihre Vernetzung zu erproben. FlexiPlant wird in einzigartiger Weise die Entwicklung und Vernetzung adaptiver und flexibler Ressourcentechnologien, sowie ihren Transfer in die industrielle Nutzung ermöglichen.

ABKÜRZUNGSVERZEICHNIS

ACDC: ACcelerator-Driven multipurpose ion beam Complex (HZDR)
AFM: atomic force microscop (Rasterkraftmikroskop)
AMANDA: Autonomous Materials and Device Application (FZJ)=
AWI:Alfred-Wegener-Institut
BCRT: Berlin-Brandenburger Centrum für Regenerative Therapien
BESSY II: Berliner Elektronenspeicherring
BMBF: Bundesministerium für Bildung und Forschung
BMT: Biomedizintechnikum (HZG Teltow)
CCA: Cross-cutting Activity
CSD: Center for Simulation and Data Sciences (FZJ)
CRYRING@ESR: erstes Großgerät der FAIR-Beschleunigeranlage (GSI, Helmholtz-Institut Jena)
CT: Computertomographie
CXNS: Center for X-ray and Nano Science (DESY)
DALI: Dresden Advanced Light Infrastructure (HZDR)
DESY: Deutsches Elektronen-Synchrotron
DiLAB: Digital Design and Fabrication Lab (HZG)
DLR: Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt
ELBE: Elektronen Linearbeschleuniger für Strahlen hoher Brillanz und niedriger Emittanz (HZDR)
ELISE: Evolutionary Light Structure Engineering (AWI)
EM: Elektronenmikroskopie
EMIL: Energy Materials in-situ Laboratory Berlin
ER-C: Ernst Ruska Zentrum (FZJ)
European XFEL: Europäischer Röntgenlaser in Schenefeld bei Hamburg
EuU: Erde und Umwelt
FB: Forschungsbereich
FLAME: Future Lab for Additive Manufacturing and Engineering (DLR)
FLASH: Freie-Elektronen-Laser in Hamburg (DESY)
FZJ: Forschungszentrum Jülich
GEMS: German Engineering Materials Science Centre
GSI/FAIR: GSI Helmholtz Centre for Heavy Ion Research/Facility for Antiproton and Ion Research
HDF: Helmholtz Data Federation
HGF: Helmholtz-Gemeinschaft
HEMF: Helmholtz Energy Materials Foundry
HEMCP: Helmholtz Energy Materials Characterization Platform
HLD: Hochfeld-Magnetlabor Dresden
HIPS: High Impact Polystyrene (hochschlagfestes Polystyrol)
HMGU: Helmholtzzentrum München
HNF: Helmholtz Nano Facility
HPC: High Performance Computing (KIT)
HQC: Helmholtz Quantum Center (FZJ)
HTC/PTC: Hydrogen Technology Centre und Polymer Technology Centre (HZG)
HZB: Helmholtz-Zentrum Berlin
HZG: Helmholtz-Zentrum Geesthacht (ab 31.3.2021: Hereon – Helmholtz-Zentrum Hereon)

IBC: Ion Beam Center (HZDR)
 ICT: Information and Communication Technologies
 IDAF: Interdisciplinary Data and Analysis Facility (DESY)
 IFMIF-DONES: International Fusion Materials Irradiation Facility - Demo Oriented NEutron Source (KIT)
 IMI: Innovative Medicines Initiative
 InnoMatSy: In-Situ Innovation Platform for Multifunctional Materials Systems (HZG)
 ITN: Innovative Training Networks
 IVF: Impuls- und Vernetzungsfonds der Helmholtz-Gemeinschaft
 JARA-CSD: Jülich Aachen Research Alliance-Center for Simulation and Data Science (RWTH Aachen, FZJ)
 JCNS: Jülich Centre for Neutron Science (FZJ)
 JL: Joint Lab (Querschnittsaktivität des FB Information)
 JSC: Jülich Supercomputing Centre (FZJ)
 KARA: Karlsruhe Research Accelerator (KIT)
 KCOP: Karlsruhe Center of Optics and Photonics (KIT)
 KI: Künstliche Intelligenz (engl. artificial intelligence, AI)
 KIT: Karlsruher Institut für Technologie
 KIT-BaTec: Batterietechnikum Karlsruhe
 KNMFi: Karlsruhe Nano Micro Facility for information
 LSDF: Large Scale Data Facility (KIT)
 LRV: Luftfahrt- Raumfahrt und Verkehr
 MagIC: Magnesium Innovation Center (HZG)
 MAP: Materials Acceleration Platform
 MBC: Magnesium Biomaterials Centre (HZG)
 MDC: Max-Delbrück-Centrum für molekulare Medizin
 MDMC: Integrated Model- and Data-driven Material Characterization (Joint Lab des FB Information)
 MLZ-FRM II: Forschungs-Neutronenquelle Heinz Maier-Leibnitz
 MOF: metallic organic framework (Metallorganische Gerüststrukturen)
 MRI: Magnetic Resonance Imaging
 MTC: mechanisch-chemisch-thermische Prüfeinrichtungen (DLR)
 NanoLab: Nano Laboratorium (DESY)
 NextGenBat: Next Generation Batteries (RWTH Aachen)
 NFDI: Nationale Forschungsdateninfrastruktur
 NMR: nuclear magnetic resonance (Kernspinresonanz)
 PEM Elektrolyse: Proton Exchange Membrane Elektrolyse
 PET: Positronen-Emissions-Tomographie
 PETRA III / IV: Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY)
 PHTC: Polymer and Hydrogen Technology Centre (HZG)
 PoF: Programm-orientierte Förderung
 PVcomB: Competence Centre Thin-Film- and Nanotechnology for Photovoltaics Berlin
 QC/QT: Quantencomputing / Quantentechnologie
 SIS-18: Schwerionensynchrotron (GSI)
 UNILAC: Universal Linear Accelerator (GSI)
 VMD: Virtual Materials Design (Querschnittsaktivität des FB Information)

Herausgeber

Helmholtz-Gemeinschaft Deutscher Forschungszentren e.V.

Verantwortlicher Vizepräsident der Helmholtz-Gemeinschaft

Prof. Dr.-Ing. Holger Hanselka⁹

Projektkoordination und Layout

Prof. Dr. Oliver Kraft⁹ und Dr. Friederike Gruhl⁹

Autoren-Team

Dr. Isolde Arzberger³, Dr. Daniela Brieler⁸, Dr. Harald Buddeweg¹, Prof. Dr. Helmut Ehrenberg², Dr. Christian Ertler², Prof. Dr. Jens Gutzmer⁷, Dr. Sandra Hamann⁷, Dr. Martina Hansen⁵, Prof. Dr. Manfred Helm⁷, Dr. Sven Kiele², Prof. Dr. Thomas Klassen⁴, Prof. Dr. Arnulf Latz², Dr. Kerstin Mehnert⁸, Prof. Dr. Barbara Milow², Prof. Dr. Andreas Stierle¹, Dr. Maria Eugenia Toimil-Molares⁴, Prof. Dr. Christine Rösch⁹, Prof. Dr. Michael Sattler⁵, Dr. Olaf Schwarzkopf⁶, Prof. Dr. Claus M. Schneider³, Prof. Dr. Susan Schorr⁶, Prof. Dr. Ulrich Schurr³, Prof. Dr. Ruth Schwaiger³, Dr. Christina Trautmann⁴, Dr. Heinz Voggenreiter², Prof. Dr. Wolfgang Wenzel⁹, Prof. Dr. Regine Willumeit-Römer⁸, Prof. Dr. Joachim Wosnitza⁷

Prof. Dr. Helmut Dosch¹, Prof. Dr. Paolo Guibellino⁴, Prof. Dr. Karsten Lemmer², Prof. Dr. Wolfgang Marquardt³, Prof. Dr. Bernd Rech⁶, Prof. Dr. Matthias Rehahn⁸, Prof. Dr. Sebastian M. Schmidt⁷, Prof. Dr. Matthias Tschöp⁵

¹ DESY - Deutsches Elektronen-Synchrotron

² DLR - Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt

³ FZJ - Forschungszentrum Jülich

⁴ GSI - Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung

⁵ HMGU - Helmholtz Zentrum München

⁶ HZB - Helmholtz-Zentrum Berlin

⁷ HZDR - Helmholtz-Zentrum Dresden Rossendorf

⁸ HZG - Helmholtz-Zentrum Geesthacht | Zentrum für Material- und Küstenforschung
(ab 31.3.2021: Hereon - Helmholtz-Zentrum Hereon)

⁹ KIT - Karlsruher Institut für Technologie

Weitere Mitwirkende

Michael Gotthardt (MDC), Claus-Michael Lehr (HZI-HIPS), Stefanie Speidel (DKFZ/NCT Dresden), Matthias Meier und Gil Westmeyer (HMGU)

Bildnachweise

Titelseite und S. 28: Deutschlandkarte (AdobeStock 221119809) mit Schwerpunktthemen; S. 6: Nanotechnology concept - graphene molecules (AdobeStock 257349227); S. 10/12: KIT/Quantenphysik (0190122-CN-01-002); S. 10/14: DESY/PETRA III (csm_Stephan_Roth_PETRA_III_900px_f902ce2e44); S. 10/16: KIT/Windrad und Solarmodul (20200823-CN-01-008); S. 10/19: KIT/Alexander Gerst (20140428-CS-02-015); S. 10/20: small tree growing with sunshine in garden. eco concept (AdobeStock 308429734); S. 10/21: neural cell (AdobeStock 51149518); S. 22: 3d illustration connecting people on the internet, social network connection (AdobeStock 204527293); S. 25: neuroscience & data (AdobeStock 313313191); S. 26: KIT/Doktoranden (20140219-CS-02-046); S. 27: Innovative idea in the hand of businesswoman. Innovative idea Concept (AdobeStock 219506488); S. 29: KIT/ Organische Solarzellen (20160407-CS-01-001); S. 69: KIT/Mikrostrukturen (20100506-CN-01-005); S.68/71: HZB/BESSY II-Halle (5. Gemeinsames Nutzertreffen BER II und BESSY II); S. 68/74: KIT/ Blick in den Kaltgang des ForHLR (20160226-CN-01-012); S. 68/76-1. Bild: KIT/VATESTA Testanlage (20150529-CN-01-018); S. 68/76-2. Bild: KIT/ Das Innere des KATRIN Hauptspektrometers (18_20120508-CN-01-015); S. 68/76-3. Bild: KIT/PS 450-TO (20121115-CN-01-014); S. 68/76-4. Bild: KIT/IMT (20180411-CN-01-003)

Layout und Satz

Heike Gerstner, AServ - Dok - CrossMedia (CroM)
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

Stand

April 2021

