

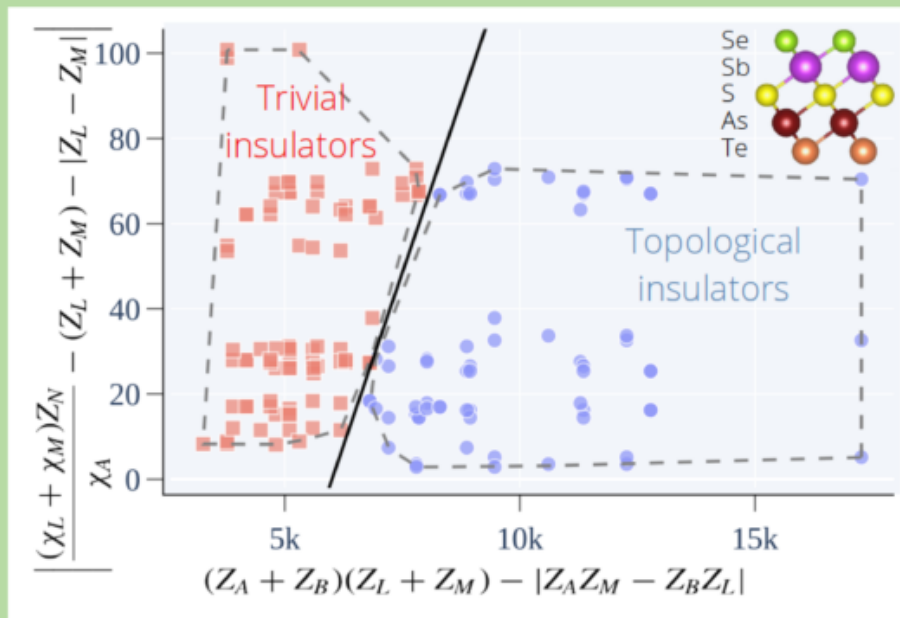


ISSN 2193-3758

Mitteilungsblatt
Nr. 110 / 2020



Deutsche Gesellschaft
für Kristallwachstum und
Kristallzüchtung e.V.

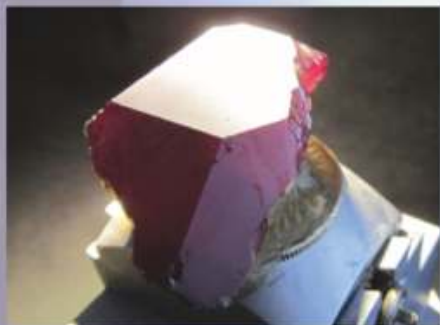


Inhaltsverzeichnis

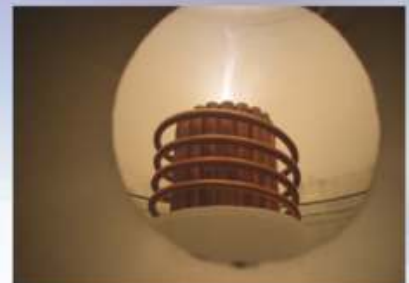
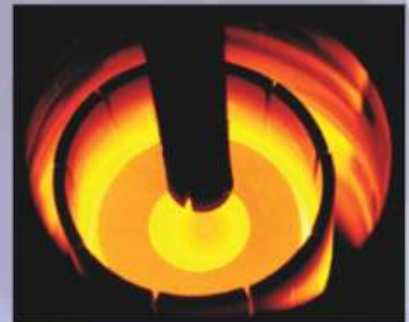
Der Vorsitzende / Editorial	3
DGKK Fokus	5
DGKK Nachrichten	12
DGKK Personen	17

SurfaceNet

Crystals



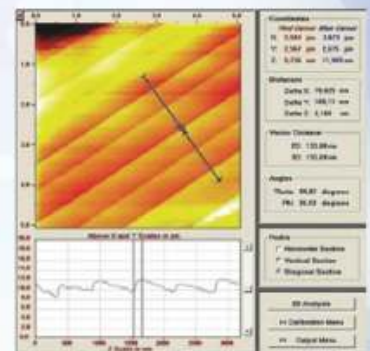
Crystal Puller



Wafers



Analytical Services



Substrates Custom Parts

Sputter Targets PLD Targets Custom Crystal Growth

SurfaceNet GmbH

Oskar-Schindler-Ring 7 · 48432 Rheine – Germany
Telefon +49 (0)5971 4010179 · Fax +49 (0)5971 8995632
sales@surfacenet.de · www.surfacenet.de

Der Vorsitzende

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

im Namen des gesamten Vorstandes wünschen ich Ihnen für das Neue Jahr viel Freude, Erfolg und Gesundheit und uns allen ein baldiges persönliches Wiedersehen in diesem Jahr 2021, nach diesen monatelangen fast ausschließlich virtuellen Kontakten! Unsere Gesellschaft lebt ja von den persönlichen Kontakten und den lebhaften Diskussionen im Rahmen unserer Workshops und Tagungen. Deshalb haben die Veranstalter der DKT 2021 in Berlin und der Vorstand beschlossen, unsere nächste Jahrestagung in den Herbst 2021 zu verschieben. Auch unsere europäischen Kollegen sehen das ähnlich, so dass auch die ECCG-7 Tagung und die Schule ESCG-3 nicht in einem virtuellen Format umgeplant, sondern in das nächste Jahr verschoben werden. Zumindest unseren Kristallen scheint ja die gespenstische Ruhe an und um unsere Arbeitsstätten gut zu tun, wie ich an der Qualität unserer eigenen Züchtungsergebnisse sehe. Deshalb bin ich sehr zuversichtlich, dass wir nach dieser unfreiwilligen Durststrecke mit besonders guten Ergebnissen belohnt werden und freue mich schon auf die kommenden, spannenden Präsentationen! Bei der Vielzahl von Manuskripten, die ich in den letzten Monaten von unseren Fachzeitschriften zur

Begutachtung bekommen habe, muss das vergangene Jahr überaus produktiv gewesen sein. In diesem Zusammenhang möchte ich auch noch einmal Betreuerinnen und Betreuer von wissenschaftlichen Abschlussarbeiten daran erinnern, auch eine Zusammenfassung für unser Mitteilungsblatt einzureichen.

Leider ist die persönliche Übergabe der Urkunden für unsere Ehrenmitglieder und die Würdigungen der 50-jährigen Mitgliedschaft in unserer Gesellschaft den der Pandemie bedingten Vorsichtsmaßnahmen zum Opfer gefallen. Ich habe zwar die Urkunden noch im Jubiläumsjahr versendet, möchte aber die persönlichen Würdigungen sobald wie wieder möglich nachholen. Über alle aktuellen Entwicklungen werden wir auch weiterhin im Mitteilungsblatt, auf der Homepage und per Rundbrief informieren müssen. Glücklicherweise sind wir mit der Kristallzüchtung beschäftigte Menschen aber ja per se mit großer Geduld ausgestattet, so dass ich auch hier sehr optimistisch bin, dass wir alle wohlbehalten durch diese schweren Zeiten kommen und wünsche Ihnen allen hierfür alles Gute,

Andreas Danilewsky

Inhaltsverzeichnis

Der Vorsitzende	3
Editorial	4
Titelbild	4
DGKK-Fokus	5
Artificial-intelligence-driven materials science	5
DGKK-Nachrichten	12
Workshop WODIL 2020 im IKZ	12
Jubilare	13

Mitglieder 2020, zweite Jahreshälfte	13
SYNERGIE: Auf der Spur schädlicher Metalle	14
Kooperation DESY und IKZ	15
3. Platz bei INNOspace Masters	15
Kooperation HZB und IKZ	16
DGKK-Personen	17
Darrel G. Schlom Leibniz-Chair am IKZ	17
Christian Kränkel (IKZ) zum OSA Fellow gewählt	18
Über die DGKK	19

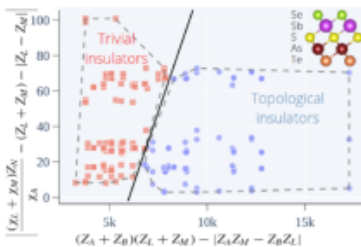
Editorial

Verehrte Leserinnen und Leser,

Ihnen allen wünsche ich ein gesundes und gutes Jahr 2021! Auch in unserer Welt der Materialwissenschaft finden zunehmend Methoden der Künstlichen Intelligenz Anwendung. Einen Einblick nicht nur in die Grundlagen, sondern bishin zu einem Link zur Eingabe eigener Daten in die Nutzeroberfläche einer derartigen Software bietet der Fokus-Artikel von Luca M. Ghiringhelli über die Artificial-Intelligence getriebene Suche nach neuen Materialien (ab S. 5). Leider gab es in letzter Zeit nur noch wenige wissenschaftliche Zusammenkünfte im

physischen Sinn. Eine davon war der 9. deutsch-französische Workshop zu Oxid-, dielektrischen und Laserkristallen (WO-DIL 2020), den Matthias Bickermann + Team im September am Leibniz-Institut für Kristallzüchtung in Berlin-Adlershof organisiert hatte (S. 11). Weil Konferenztermine gegenwärtig nicht wirklich dingfest gemacht werden können, haben wir in dieser Ausgabe des Mitteilungsblatts auf den Tagungskalender verzichtet. Eine interessante Lektüre wünscht Ihnen Klaus Böttcher

Titelbild



Quelle: L. Ghiringhelli

Two-dimensional map of tetradymite materials, classified as trivial vs topological insulators, learned by applying an artificial-intelligence tool developed in the Novel Materials Discovery (NOMAD) Laboratory. The method finds low-dimensional maps where the axes are interpretable, i.e., are analytic expressions of simple physical properties of the materials. Here, the descriptor (i.e., the axes' coordinates) depends on the atomic number Z_i and the Pauling electronegativity χ_i of species $i = \{A, B, L, M, N\}$. Tetradymites are materials with the general chemical formula $AB-LMN$, where the cations $A, B \in \{As, Sb, Bi\}$ and the anions $L, M, N \in \{S, Se, Te\}$, and a trigonal ($R3m$) symmetry. The structure of the quinary tetradymite $AsSbSeTe$ is shown as example. The topological (trivial) insulator training points, bounded by the respective convex hulls, are marked in blue (red). The solid line represents the predictive model, separating the predicted topological vs trivial insulators.

Material-Technologie & Kristalle für Forschung, Entwicklung und Produktion

- ▲ Kristallzüchtungen von Metallen, Legierungen und Oxiden
- ▲ Kristallpräparation (Formgebung, Polieren und Orientieren)
- ▲ Reinstmaterialien (99,9 – 99,99999 %)
- ▲ Substrate ($SrTiO_3$, MgO , YSZ , ZnO , Al_2O_3 , etc.)
- ▲ Wafer (Si , Ge , $ZnTe$, $GaAs$ und andere HL)
- ▲ Sputtertargets
- ▲ Optische Materialien (Fenster, Linsen, etc.)
- ▲ Auftragsforschung für Werkstoffe und Kristalle



MaTeck

Im Langenbroich 20
52428 Jülich
Tel.: 02461/9352-0
Fax: 02461/9352-11
eMail: info@mateck.de

Besuchen Sie uns im Internet (inkl. Online-Katalog):
www.mateck.de

DGKK-Fokus

Artificial-intelligence-driven quest for new materials

Luca M. Ghiringhelli, Novel Materials Discovery (NOMAD) Laboratory am Fritz-Haber-Inst. der Max-Planck-Ges., Berlin

The total number of possible materials (the ‘materials space’) is practically infinite. Even the smaller space of inorganic crystals is enormous, with a practically infinite number of as-yet-undiscovered materials, compared to the about 225 000 identified ones [spr20]. The Materials-Genome Initiative for Global Competitiveness, launched in 2011 as a White-House initiative, is based on the observation that materials science is globally one of the most important and promising sources of innovation. Since fall 2015, several centers have been established providing significant resources to materials-genomics high-throughput screening experiments and calculations [Him19].

Data-driven science has been identified as the 4th paradigm of scientific research [Hey09]. Obviously, science has always been data driven, i.e., empirical, but the novelty introduced by the new paradigm is two-fold. First the creation of large, interconnected databases of scientific data, which are expected to comply with the so-called FAIR principles [Wil16] of scientific data management and stewardship: i.e., data and related metadata should be Findable, Accessible, Interoperable, and Reusable/Repurposable. The second aspect is the massive use of artificial-intelligence (AI) algorithms, applied to scientific data, in order to find patterns and trends that would be probably impossible to identify by human observation. This is due primarily to the complexity, combined to the sheer volume, of the available data. Here, we use AI as an umbrella term for all data-science related techniques, including, e.g., data mining, compressed sensing, statistical (or machine) learning (which in turn includes representation learning and deep learning). Materials science has been embracing in the last few years both aspects.

Following historical endeavors that compiled experimental data [spr20], databases of computational materials-science data have been created via high-throughput screening initiatives starting in the early 2010’s [Jai11, Cur10, Saa13]. More recently, at the end of 2014, the NOMAD CoE (Novel Materials Discovery Center of Excellence), launched the first FAIR storage infrastructure for computational materials-science data [Dra18, Dra19, Dra20], even before the FAIR principles were spelled out. More in details, the NOMAD Repository (which contains also all the calculations present in the major US databases, i.e., Materials Project [Jai11], AFLOW (Automatic Flow of Materials Discovery Library, [Cur10]) and OQMD (Open Quantum Materials Database, [Saa13])) stores input and output files from more than 40 different atomistic (*ab initio* and molecular mechanics) codes. As of today, the NOMAD Repository totals more than 100 million calculations, uploaded by materials scientists all over the globe. The NOMAD Archive stores the same information, but represented by means of a metadata schema, the NOMAD MetalInfo [Ghi17a], which allows for the labeling of most of the data in a

code-independent format. The translation from the content of raw input and output files into the code independent MetalInfo format makes the data ready for AI analysis.

AI in materials science has concerned both the modeling of potential-energy surfaces (PES) by means of statistical models that promise to yield *ab initio* accuracy at a fraction of the evaluation time [Btk10, Beh11, Sut17, Xie18] (i.e., not considering the CPU time necessary to produce the training data set) and the so-called materials informatics, i.e., the statistical modeling of materials aimed at predicting their physical, often technologically relevant properties [Raj15, Kim16, Jha18, Ghi15, Ouy18, Bar18a]. The usefulness of the PES learning is hampered by the necessity of large training datasets, which are typically constructed *ad hoc*, and by a limited transferability (i.e., the learning restarts essentially from scratch for each new system). In contrast, materials informatics aims at unlocking the understanding of the materials genome, i.e., the minimal set of descriptors (the materials’ genes) that explain and determine properties of interest. This aspect, together with the observation that only a limited amount of the almost infinite number of possible materials is known today, may lead to the identification of undiscovered materials that have properties (conductivity, plasticity, elasticity, etc.) superior to the known ones.

In the application of AI to materials science, the crucial step is the identification of the so-called *descriptor*, i.e., the set of parameters capturing the underlying mechanism of a given materials property or function, which constitutes the numerical input for the machine-learning model. The descriptor is typically carefully designed by the researcher, by imposing known physical symmetries and constraints. Alternatively, following the strategy introduced in Ref. [Ghi15], the descriptor can be learned from the data, more precisely the best descriptor can be identified among a possibly immense set of candidates by exploiting a combination of symbolic regression (a technique for inferring symbolic equations rather than just the numerical values of fitting parameters) and the signal-analysis technique known as compressed sensing (CS).

The CS approach has been shown to reconstruct a high-quality “signal”, starting from a very small (sparse) set of *observations* [Can08, Nel13]. Mathematically, given a set of samples measured incoherently, P , CS finds the sparse solution c of an underdetermined system of linear equations $Dc = P$ (D is called the *sensing matrix*, with number of columns much larger than number of rows).

The recasting CS into materials-science challenges [Ghi15, Ghi17b] starts from a set of materials m_i with observable properties listed in vector P_i and a possibly immense list of test features d_j (forming the so-called features space); the projection of each i -material into the j -feature forms the i, j

components of the sensing matrix D . The sparse solution of " $\arg \min_c (\|P - Dc\|_2^2 + \lambda \|c\|_0)$ ", where $\|c\|_0$ is the ℓ_0 (quasi)norm of c (i.e., the number of its nonzero components), gives the optimum D -dimensional descriptor, i.e., the set of features *selected* by the D non-zero components of the solution vector c . The first term in the minimized expression is a familiar mean squared error, as in least-square regression; the second term is known as regularization. In this case, a *penalty* is paid for every non zero component of c . Effectively, CS performs a *dimension reduction* from the large input features space to the selected (low-dimensional) descriptor. Differently from most dimension-reduction schemes [Guy03], the solution provided by CS is *interpretable*, in the sense that the components of the selected descriptor are a subset of the input features and can be further analyzed by usual functional analysis tools.

SISSO [Ouy18] is a recently developed method, built by combining symbolic regression with compressed sensing, and designed for identifying low-dimensional descriptors for material properties. It is an iterative scheme that combines the sure independence screening (SIS) [Fan08] scheme for dimension reduction of huge features space and the sparsifying operators for finding sparse solutions. SISSO can deal with highly correlated features spaces and can efficiently manage immense features spaces.

For applying SISSO, a feature space Φ_q is constructed by starting from a set Φ_0 of primary features and a set of unary and binary operators (such as $+$, $-$, \exp , $\sqrt{\quad}$, \dots). The features are then iteratively combined with the operators, where at each iteration each feature (pair of features) is exhaustively combined with each unary (binary) operator, with the constraint that sums and differences are taken only among homogeneous quantities. The index q in Φ_q counts how many such iterations were performed. The primary features are typically physical properties of gas-phase atoms (e.g., ionization potential, radius of s or p valence orbital, etc.) and *collective* properties of group of atoms (e.g., formation energy of dimers, volume of the unit cell in a given crystal structure, average coordination, etc.) [Ouy18]. Φ_q contains features in terms of mathematical expressions; when the values of the features are determined for each material m_i , the matrix D of numerical values of the features is constructed. The properties of gas-phase atoms — in short, *atomic properties* — are repurposable, in the sense that they can be used for many descriptor and model learning.

SISSO for categorical properties. A (materials' property) map (see Fig. 3) is a low-dimensional representation of the materials space where each material is represented by means of a convenient descriptor (the component of the descriptor are the coordinates in the low-dimensional representation) such that all materials sharing a certain property (e.g., being metal, or topological insulator, \dots) are located in the same convex hull. In a good/useful map, hulls containing materials with exclusive properties (e.g., metals vs insulators) do not overlap. The mathematical formulation of SISSO for classification [Ouy18] substitutes a measure of overlap between convex hulls to the usual mean squared error adopted in con-

tinuous problems [Ouy18] For a property with M categories:

$$\arg \min_c \sum_{I=1}^{M-1} \sum_{J=I+1}^M O_{IJ}(D, c) + \lambda \|c\|_0 \quad (1)$$

where $O_{IJ}(D, c)$ is the number of data in the overlap region between the I -domain and these J -domain, c is a vector with elements 0 or 1, so that a feature k (the k -th column of D is selected (deselected) when $c_k = 1(0)$, and λ is a parameter controlling the number of nonzero elements in c . O_{IJ} depends on (D, c) in the sense that the nonzero values of c select features from D that determine the position (coordinates) of the data and the shape of the convex hulls.

Application to prediction of stability of a ABX_3 material as perovskite. SISSO has been successfully applied to identifying descriptors for relevant materials-science properties [Ouy18, Aco18, Bar18a, Bar18b]. Here, I summarise the identification of a new descriptor for the prediction whether materials with prototype chemical formula ABX_3 are stable or not as perovskites [Bar18a].

The perovskite crystal structure (see Fig. 1, left panel) is defined for any ABX_3 compound as a network of corner-sharing BX_6 octahedra surrounding a larger A -site cation ($r_A > r_B$), where the cations A and B can span the periodic table and the anion X is typically a chalcogen or halogen. Distortions from the cubic structure can arise from size-mismatch of the cations and anion, which results in additional perovskite structures and nonperovskite structures. The B cation can also be replaced by two different ions, resulting in the double perovskite formula, $A_2B'B''X_6$. Single and double perovskite materials possess exceptional properties for a variety of applications such as electrocatalysis, proton conduction, ferroelectrics, battery materials, as well as photovoltaics and optoelectronics.

Predicting the stability of the perovskite structure remains a longstanding challenge for the discovery of new functional materials for many applications including photovoltaics and electrocatalysts. Most of the approaches that addressed this challenge require several computationally demanding electronic-structure calculations for each material composition, thus limiting their use to a small set of materials [Kir83, Doy98, Goe04, Oga11]. Alternatively, descriptor-based approaches enable high-throughput screening applications because they provide rapid estimates of material properties [Cur13]. A notable example of "human learned" descriptor is the Goldschmidt tolerance factor [Gdt26], t , introduced in 1926 and since then used extensively to predict the stability of the perovskite structure based only on the chemical formula, ABX_3 , and the ionic radii, r_i , of each ion ($i = A, B, X$):

$$t = \frac{r_A + r_X}{\sqrt{2}(r_B + r_X)} \quad (2)$$

The prediction accuracy of t has been pointed out [Liw17] to be not very high, especially for compounds containing heavier halides. Considering a dataset of 576 ABX_3 experimentally characterized material compositions [Zha07, Lic08, Tra16], the overall prediction accuracy of t is 74% (see also Fig. 1).

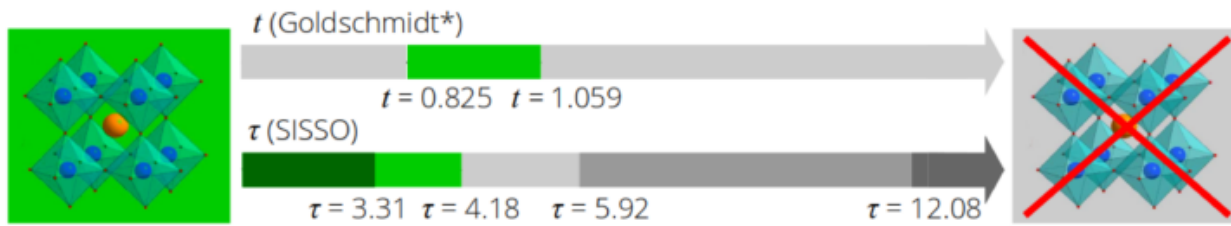


Fig. 1: One-dimensional maps of the tolerance factor for perovskite-stability prediction proposed by Goldschmidt (t) vs τ , which is inferred by artificial intelligence (symbolic regression). The green (grey) areas are the domains of predicted stability (instability) of perovskites. The boundary of t were trained via a decision-tree classifier over the same dataset used for SISSO, hence the asterisk. In the case of τ , the darker green and grey areas are regions of 100% prediction accuracy. So, if for a material τ is smaller than 3.31 or larger than 12.08, its classification is certain. At $\tau = 4.18$, the predicted probability that a material is a perovskite is 50% and the probability to be perovskite smoothly decrease from left to right.

Using as starting dataset the same 576 ABX_3 materials, Bartel *et al.* [Bar18a] set up SISSO by starting from the ionic radii as for t as input features, plus the oxidation numbers ν_i (in t , the oxidation numbers are implicitly used to determine which value for ionic radius, which depend on ν , is used in the formula). Out of a constructed feature space of 3×10^9 features (up to the third iteration of feature/operator combination, hence Φ_3), the following 1D descriptor was identified:

$$\tau = \frac{r_X}{r_B} - \nu_A \left(\nu_A - \frac{r_A/r_B}{\ln r_A/r_B} \right) \quad (3)$$

This new tolerance factor τ shows a prediction accuracy of 94% and nearly uniform performance across the five anions evaluated. Like t , the prediction of perovskite stability using τ requires only the chemical composition, allowing the tolerance factor to be agnostic to the many structures that are considered perovskite. In addition to predicting if a material is stable as perovskite, τ also provides a monotonic estimate of the probability that a material is stable in the perovskite structure. The accurate and probabilistic nature of τ as well as its generalizability over a broad range of single and double perovskites (where the average of $r_{B'}$ and $r_{B''}$ is used in the formula in r_B 's stead) allows for new physical insights into the stability of the perovskite structure. As a direct result, Bartel *et al.* report the prediction of 23 314 new double perovskite oxides and halides.

The NOMAD Analytics Toolkit. AI approaches like SISSO are promising tools that could become part of the modern materials scientist's set of skills. In this respect, it is fundamental for any researcher adopting such methods to share not only the data used for training the algorithms, but also the (implemented) learning algorithm themselves. This has both educational/tutorial purposes and the merit of improve scientific reproducibility. Besides maintaining a large (and growing) Repository & Archive, the NOMAD Laboratory also provides the infrastructure to share data-analytic tools, in terms of python (or other languages) notebooks.

The AI Toolkit (<https://nomad-lab.eu/AItutorials>) pushes to the next, necessary step the concept of FAIR data, by recognizing that the most promising purpose of the FAIR principles is enabling AI analysis of the stored data. As a mnemonic, we can frame the next step in FAIR data by upgrading its meaning to: Findable and AI-Ready data.

The mission of the NOMAD AI Toolkit is three-fold (Fig. 2):

- Providing API and libraries for accessing and analysing the NOMAD Archive data via state-of-the-art (and beyond) AI tools.
- Providing a set of shallow-learning-curve tutorials from the hands-on introduction to the mastering of AI techniques.
- Constructing a Collection of notebooks, each dedicated to an AI-based materials-science publication. By providing both the annotated data and the scripts for their analysis, students and scholar worldwide are enable to follow all the steps that the original researchers followed to reach publication-level results. This brings reproducibility in science and dissemination of new ideas to an unprecedented level in the history of (materials) science.

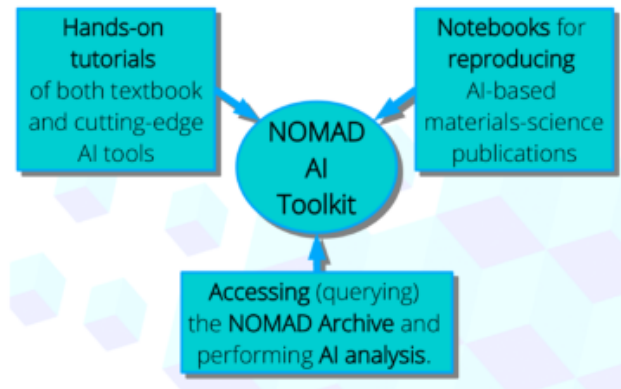


Fig. 2: The three-fold purpose of the NOMAD Artificial-Intelligent Toolkit.

Discovering of new topological insulators. A recent publication [Cao20] based on SISSO for the prediction of properties of quantum materials is an example of how the AI Toolkit can promote the diffusion of outstanding data-driven materials science, by means of complementary, interactive material to the traditional paper.

Topological insulators (TIs) constitute a theoretically predicted [Vol85] and recently discovered [Hsi08] class of quantum materials characterized by having insulating bulk but metallic boundary states. The boundary states, which are protected by time-reversal symmetry [Has10], possess a spin-momentum locked Dirac structure in which backscattering is suppressed, therefore favoring dissipationless electronic conduction. This

property makes TIs promising materials for technological application in areas like spintronics [Bru12, Mel14], catalysis [Che11], and thermoelectricity [XuY14]. The addressed class of materials was the tetradymites family, i.e., materials with the general chemical formula $AB-LMN$, where the cations $A, B \in \{\text{As}, \text{Sb}, \text{Bi}\}$ and the anions $L, M, N \in \{\text{S}, \text{Se}, \text{Te}\}$, and a trigonal (R3m) symmetry. Some of these materials are known to be topological insulators. In [Cao20], we have addressed the SISO-driven learning of a descriptor for predicting which tetradymites are topological insulator. The data-driven task was to predict the classification (topological vs trivial insulators) of all possible such materials, just by knowing their formula, by using as training data a set of 152 tetradymites for which the topological invariant Z_2 is calculated via DFT for the optimized geometries.

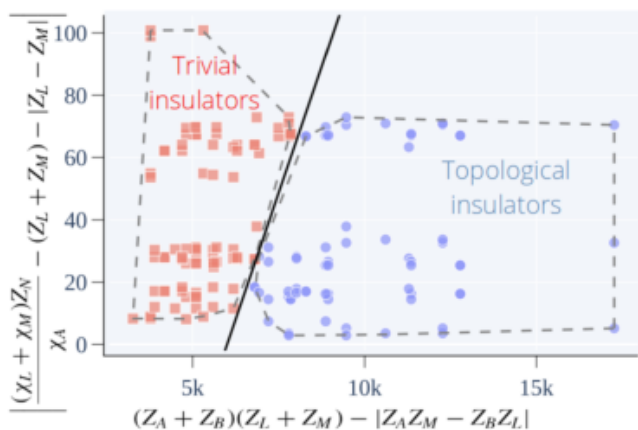


Fig. 3: SISO-learned 2-dimensional map of $AB-LMN$ tetradymite materials, as produced with the AI-Toolkit visualizer. The topological (trivial) insulator training points, bounded by the respective convex hulls, are marked in blue (red). The descriptor (axes' coordinates) depends on the atomic number Z_i and the Pauling electronegativity χ_i of species i . The solid line $y = -238.23 + 0.039x$ represents the predictive model, separating the predicted topological vs trivial insulators.

In the notebook “Discovery of new topological insulators in alloyed tetradymites” that can be accessed from the AI-Toolkit main page, we invite the user to reproduce the same results as in Ref. [Cao20], namely the materials property map as shown in Fig. 3. The map is obtained within the notebook, after selecting as input settings the same primary features and other SISO parameters as used for the publication. With the notebook “Discovery of new topological insulators in alloyed tetradymites”, we provide an interactive, complementary

References

(The numbers in the labels mark the year, e.g. [Aco18] means an article from 2018, but [Gdt26] one from 1926.)

[spr20] (N.d.), <https://materials.springer.com>

[Aco18] Acosta, C. M. et al.: Analysis of Topological Transitions in Two-dimensional Materials by Compressed Sensing, arXiv:1805.10950.

[Bar18a] Bartel, C. J. et al.: New Tolerance Factor to Predict the Stability of Perovskite Oxides and Halides, Sci. Adv., in press; arXiv:1801.07700.

[Bar18b] Bartel, C. J. et al.: Physical descriptor for the Gibbs

support to Ref. [Cao20], where the user can reproduce the results of the paper starting with the same input, by using the same code, and by going as far as re-obtaining exactly the same main result plot (except for the different graphical style). More than what can be found in the paper, the user can change the input settings to the SISO learning, explore the results by changing the visualization settings and browsing the structures of the single data points. The user can also use the notebook as a template and start from other data, retrieved from the NOMAD Archive, to perform an analysis with the same method, etc.

We hope this example could be an inspiration to augment future publications with similar hands-on notebooks. This will allow for enhanced reproducibility of data-driven materials science papers and dampen the learning curve for newcomers to the field. As explained in section II, new contributions from the wider community are welcome to the NOMAD AI Toolkit.

As conclusions of the present summary on SISO and its applications, some general remarks are appropriate. The equations found by SISO are not necessarily unique and all components of the descriptors may change at each added dimension. This reflects the approximate nature of the equations and the unavoidable relationships among features (one or more primary features may be accurately described by nonlinear functions of a subset of the remaining features). We also note that the mathematical constraints imposed in order to obtain solutions efficiently (minimally overlapping convex hulls), are very flexible but not complete. I.e., the found descriptor \rightarrow property relationship is intrinsically approximate.

I acknowledge Matthias Scheffler, the main driving force behind all the works and activities presented in this contribution, as well as all the co-PIs of the NOMAD CoE. I also thankfully acknowledge the developers of the NOMAD AI-Toolkit, Ádám Fekete, Luigi Sbailò, Markus Scheidgen. The present-day AI-Toolkit is based on an earlier concept and development by Fawzi Mohamed and Angelo Ziletti, whom I also gratefully acknowledge. The projects described in this paper have received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation program (#951786: The NOMAD Laboratory — an European Center of Excellence and #740233: TEC1p).

energy of inorganic crystalline solids and temperature-dependent materials chemistry, Nat. Commun. Vol. 9, p. 4168.

[Btk10] Bartok, A. et al.: Gaussian approximation potentials: The accuracy of quantum mechanics, without the electrons, Phys. Rev. Lett. 104 (13), p. 136403

[Beh11] Behler, J.: Atom-centered symmetry functions for constructing high-dimensional neural network potentials, The Journal of chemical physics 134 (7), p. 074106

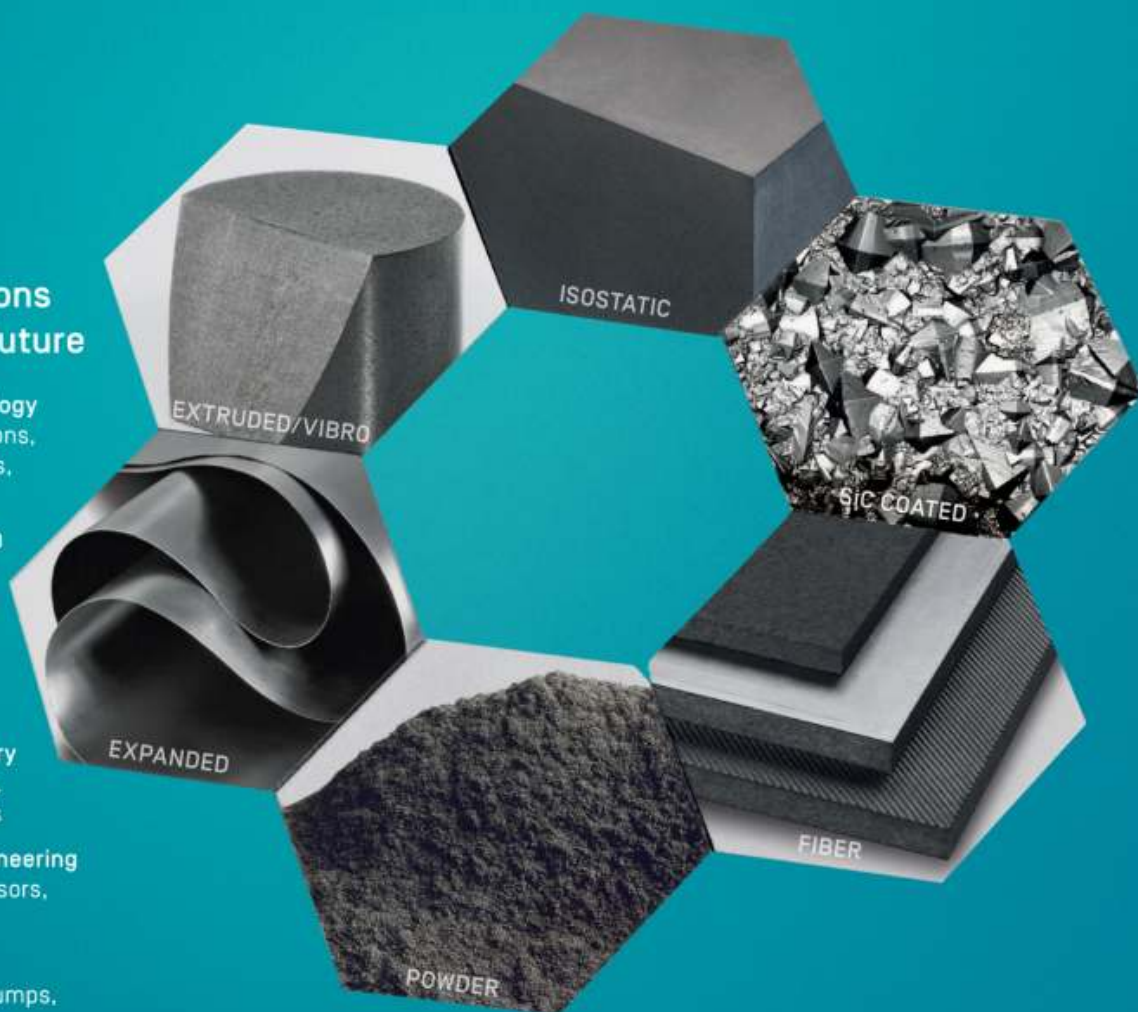
[Bru12] Brüne, C. et al.: Spin polarization of the quantum spin Hall edge states, Nature Physics 8 (6), pp. 485-490

[Cao20] Cao, G. et al.: Artificial intelligence for high-

- throughput discovery of topological insulators: The example of alloyed tetradymites, *Phys. Rev. Mat.* 4 (3), p. 034204
- [Can08] Candès, E. J. and M. B. Wakin: An introduction to compressive sampling, *IEEE Signal Proc. Mag.* 25 (2), p. 21-30
- [Che11] Chen, H. et al.: CO oxidation facilitated by robust surface states on Au-covered topological insulators, *Phys. Rev. Lett.* 107 (5), p. 056804
- [Cur10] Curtarolo, S. et al.: "AFLOW: software for high-throughput calculation of material properties", <http://materials.duke.edu/aow.html>
- [Cur13] Curtarolo, S. et al.: The high-throughput highway to computational materials design, *Nat. Mat.* 12 (3), p. 191
- [Doy98] Doye, J. P. and D. J. Wales: Thermodynamics of global optimization, *Phys. rev. Lett.* 80 (7), p. 1357
- [Dra18] Draxl, C. and M. Scheffler: NOMAD: The FAIR concept for big data-driven materials science, *Mrs Bulletin* 43 (9), p. 676-682
- [Dra19] Draxl, C. and M. Scheffler: The NOMAD laboratory: from data sharing to artificial intelligence, *Journal of Physics: Materials* 2 (3), p. 036001
- [Dra20] Draxl, C. and M. Scheffler: Big Data-Driven Materials Science and Its FAIR Data Infrastructure, *Handbook of Materials Modeling: Methods: Theory and Modeling*, p. 49-73
- [Fan08] Fan, J. and J. Lv : Sure independence screening for ultrahigh dimensional feature space, *J. R. Statist. Soc. B* 70, p. 849-911
- [Ghi15] Ghiringhelli, L. M. et al. : Big data of materials science: Critical role of the descriptor, *Phys. Rev. Lett.* 114 (10), p. 105503
- [Ghi17a] Ghiringhelli, L. M. et al.) : Towards efficient data exchange and sharing for big-data driven materials science: metadata and data formats, *npj Comput. Mat.* 3 (1), p. 46
- [Ghi17b] Ghiringhelli, L. M. et al.): Learning physical descriptors for materials science by compressed sensing, *New J. Phys.* 19 (2), p. 023017
- [Goe04] Goedecker, S.: Minima hopping: An efficient search method for the global minimum of the potential energy surface of complex molecular systems, *The J. of chem. phys.*, 120 (21), p. 9911-9917
- [Gdt26] Goldschmidt, V. M.: Die Gesetze der Krystallochemie, *Naturwissenschaften* 14 (21), p. 477-485
- [Guy03] Guyon, I. and A. Elisseeff: An introduction to variable and feature selection, *J. Mach. Learn. Res.* 3 (Mar), p. 1157-1182
- [Has10] Hasan, M. Z. and C. L. Kane: Colloquium: topological insulators, *Rev. of mod. phys.*, 82 (4), p. 3045
- [Hey09] Hey, T. et al.: The Fourth Paradigm: Data-Intensive Scientific Discovery. The concept of a fourth paradigm was probably first discussed by J. Gray at a workshop on Januar 11, 2007 before he went missing at the Pacific on January 28, 2007, Microsoft Research.
- [Him19] Himanen, L. et al.: Data-Driven Materials Science: Status, Challenges, and Perspectives, *Advanced Science* 6 (21), p. 1900808
- [Hsi08] Hsieh, D. et al.: A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase, *Nature*, 452 (7190), p. 970-974.
- [Jai11] Jain, A. et al.: A high-throughput infrastructure for density functional theory calculations, *Comput. Mater. Sci.* 50 (8), p. 2295-2310
- [Jha18] Jha, D. et al.: ElemNet: Deep learning the chemistry of materials from only elemental composition, *Scientific reports* 8 (1), pp. 1-13
- [Kim16] Kim, C. et al.: From organized high-throughput data to phenomenological theory using machine learning: the example of dielectric breakdown, *Chem. Mater.* 28 (5), p. 1304-1311
- [Kir83] Kirkpatrick, S. et al.: Optimization by simulated annealing, *science* 220 (4598), pp. 671-680
- [Lic08] Li, C. et al.: Formability of ABX₃ (X= F, Cl, Br, I) Halide Perovskites, *Acta Cryst. B: Struct. Sci.* 64 (6), p. 702-707
- [Liw17] Li, W. et al.: Chemically diverse and multifunctional hybrid organic-inorganic perovskites, *Nature Reviews Materials* 2 (3), p. 16099
- [Mel14] Mellnik, A. et al.: Spin-transfer torque generated by a topological insulator, *Nature*, 511 (7510), p. 449-451
- [Nel13] Nelson, L. J. et al.: Compressive sensing as a paradigm for building physics models, *Phys. Rev. B* 87 (3), p. 035125
- [Oga11] Oganov, A. R. et al.: How Evolutionary Crystal Structure Prediction Works and Why, *Accounts of chemical research* 44 (3), p. 227-237
- [Ouy18] Ouyang, R. et al.: SISO: A compressed-sensing method for identifying the best low-dimensional descriptor in an immensity of offered candidates, *Phys. Rev. Mater.* 2, p. 083802
- [Raj15] Rajan, K.: Materials informatics: The materials "gene" and big data, *Annu. Rev. Mater. Res.* 45, pp. 153-169
- [Saa13] Saal, J. E. et al.: Materials Design and Discovery with High-Throughput Density Functional Theory: The Open Quantum Materials Database (OQMD), *JOM* 65 (11), p. 1501-1509
- [Sut17] Schütt, K. T. et al.: Quantum-chemical insights from deep tensor neural networks, *Nat. Comm.* 8 (1), p. 1-8
- [Tra16] Travis, W. et al.: On the application of the tolerance factor to inorganic and hybrid halide perovskites: a revised system, *Chemical Science* 7 (7), p. 4548-4556
- [Vol85] Volkov, B. and O. A. Pankratov: Two-dimensional massless electrons in an inverted contact, *ZhETF Pisma Redaktsiiu* 42 (Aug.), p. 145
- [Wil16] Wilkinson, M. D. et al.: The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship, *Scientific data* 3
- [Xie18] Xie, T. and J. C. Grossman: Crystal graph convolutional neural networks for an accurate and interpretable prediction of material properties, *Phys. rev. Lett.* 120 (14), p. 145301
- [Xuy14] Xu, Y. et al.: Enhanced thermoelectric performance and anomalous Seebeck effects in topological insulators, *Phys. rev. Lett.* 112 (22), p. 226801
- [Zha07] Zhang, H. et al.: Structural stability and formability of ABO₃-type perovskite compounds, *Acta Cryst. B: Struct. Sci.* 63 (6), p. 812-818

Smart solutions for a better future

- **Furnace Technology**
Heaters, insulations,
charging systems,
crucibles
- **Epitaxy & MOCVD**
Wafer carriers
and platters
- **Energy Storage**
Powder and
bipolar plates
- **Chemical Industry**
Heat exchangers,
gaskets, sealings
- **Mechanical Engineering**
Pumps, compressors,
vessels
- **Automotive**
Fuel and water pumps,
sealings, gaskets
- **Industrial Applications**
Molds, dies, EDM electrodes



Graphite Specialties

SGL Carbon is a leading supplier of carbon and graphite based products for automotive, industrial and semi-conductor applications. We offer the broadest graphite portfolio by a full integration from feedstock production to engineering and customized services.

All our graphite products are well known throughout the industry for their high performance and lowest cost of ownership. We are qualified by major OEMs and enjoy a preferred supplier status at leading crystal growth companies, foundries and device producers.



SGL CARBON GmbH
Soehnleinstrasse 18
85201 Wiesbaden
www.sglcarbon.com/gms



Follow us on LinkedIn

DGKK-Nachrichten

Workshop zu Oxid-, dielektrischen und Laserkristallen (WODIL 2020), Leibniz-Institut für Kristallzüchtung (IKZ), Berlin, 17.-18.09.2020

Matthias Bickermann, Leibniz-Institut für Kristallzüchtung (IKZ), Berlin

Der 9. deutsch-französische Workshop zu Oxid-, dielektrischen und Laserkristallen (WODIL 2020) wurde am 17. und 18. September 2020 am IKZ in Berlin abgehalten, und zwar als reine Präsenzveranstaltung. Wir wurden beinahe von der zweiten Corona-Welle überrollt: Insbesondere die französischen Kolleg*innen mussten aufgrund der Einreisebedingungen ihre Teilnahme absagen. Immerhin konnten 21 Kollegen aus Deutschland, Frankreich, Luxemburg und Tschechien teilnehmen. Viele davon hatten sich regelrecht darauf gefreut, sich in diesen Zeiten auch persönlich zu treffen, natürlich unter strenger Einhaltung des Hygiene- und Sicherheitskonzepts. Mit den IKZ-Kolleg*innen, die auch 4 der 10 Vorträge präsentierten, war der am IKZ gelegene Max-Born-Saal dann auch schon gefüllt: Trotz der üppigen 195 m² war der Saal Corona-bedingt nur für 35 Personen freigegeben.

Der WODIL wird jährlich abgehalten; er ist 2011 aus dem DGKK-Arbeitskreis „Kristalle für Laser und nichtlineare Optik“ hervorgegangen. Da die Anzahl der akademischen Arbeitsgruppen mit mineralogischem oder kristallphysikalischem Schwerpunkt nicht nur in Deutschland immer weiter abnimmt, hat sich der Workshop zu einem mehr anwendungs- und technologieorientierten Treffen entwickelt. Der Schwerpunkt liegt weiterhin auf der Züchtung und Charakterisierung von Massivkristallen. Etwa die Hälfte der externen Teilnehmer*innen ist in der Industrieforschung tätig.

Diese enge Verzahnung aus akademischer und industrieller Forschung sowie die internationale Vernetzung entlang anwendungsorientierter Wertschöpfungsketten ist eine Folge der heutigen Forschungsförderung. Aber der Workshop zeigt auch die sehr gute Vernetzung der Community. Oxidmaterialien und ihre Anwendungen sind so divers, dass wir unsere

Kräfte bündeln müssen, um noch gehört zu werden. Mit dem WODIL haben wir dafür ein sehr geeignetes Format etabliert.

Auf dem Workshop wurden folgende Themen vorgestellt: Untersuchung von Referenzkristallen z.B. BiVO₄ für die Photokatalyse (M. Guennou, Luxembourg), Seltenerd-Calcium-Oxoborate als Piezoelektrika (M. Münchhalpen, Bochum); transiente Polaronen- und Exzitonen-Spektroskopie in LiNbO₃ (M. Imlau, Osnabrück); Tb-dotierte Laserkristalle (E. Castellano-Hernández, Berlin); Züchtung (D. Schulz, Berlin) und Charakterisierung (P. Poes, Steinfurt) des optischen Isolatormaterials KTb₃F₁₀, Züchtung von beeindruckend großen Y₃Al₅O₁₂-Kristallen (P. Pokorný, Turnov) und von Seltenerd-Sesquioxiden (A. Uvarova, Berlin) sowie von Nb₂O₅ (T. Schwaigert, Berlin); Untersuchung von ZnGeP₂ für mid-IR-Laseranwendungen (P. Piotrowski, Saint-Louis) und von Kristallen als potentielle Lumineszenzstandards (S. Schwung, Idar-Oberstein). Der IKZ-Direktor Thomas Schröder gab dazu eine Übersicht über die Aktivitäten im Haus, und natürlich wurden auch Laborführungen angeboten.

Am wichtigsten waren aber zweifellos die langen Kaffeepausen, die Postersession mit sehr regen Diskussionen und das gemeinsame Abendessen. An dieser Stelle einen herzlichen Dank an die Sponsoren des Workshops CrysTec GmbH, SciID-re GmbH, EOT GmbH, Freiberg Instruments GmbH, Korth Kristalle GmbH, Toptica Photonics GmbH und Trumpf Laser GmbH, die rund um die Kristallzüchtung tätig sind und in dieser schwierigen Zeit den Workshop mit ermöglicht und dabei auch ein sehr warmes Signal der Solidarität ausgesandt haben!



Die Teilnehmer des Workshops vor dem IKZ-Gebäude, Foto: M. Bickermann

Der WODIL war immer eine internationale Veranstaltung, und wir haben insbesondere unsere französischen Kolleg*innen sehr vermisst. Philippe Veber (Lyon), Matias Velazquez (Grenoble) und andere haben zum Erfolg der Workshopreihe wesentlich beigetragen. Wir werden alles tun, damit 2020 die traurige Ausnahme bleibt und wir nächstes Jahr wieder gemeinsam tagen können.

Der Workshop ist eine gemeinsame Zusammenarbeit der Deutschen Gesellschaft für Kristallwachstum und Kristallzüchtung (DGKK), des CNRS-Netzwerks CRISTECH (Kristallzüchtungstechnologien) und des Französischen Komitees für Kristallzüchtung (CFCC) unter der Schirmherrschaft der Französischen Gesellschaft für Kristallographie (AFC). Organisiert wird sie vom Leibniz-Institut für Kristallzüchtung (IKZ).

Jubilare

Wir gratulieren herzlich zum Geburtstag:

Herrn Dr. Werner Zulehner, Burghausen zum 80. Geburtstag

Mitglieder 2020, zweite Jahreshälfte

Wir begrüßen seit dem 03.06.2020 als neue Mitglieder (Stand 15.12.2020):

Neumitglieder / Privatpersonen:

Herr Dr. Josef Pal Leibniz-Institut für Kristallzüchtung (IKZ), Berlin
Herr M.Sc. Julian Harald Höcker Universität Würzburg

Neumitglieder / Firmen:

Rigaku Europe SE Neu-Isenburg

3|5
power electronics



**3-5 Power Electronics
GmbH**

Gostritzer Str. 61 – 63,
01217 Dresden
Tel.: +49 (0)351 8728200,
Fax: +49 (0)351 8728202
E-Mail: info@3-5pe.com



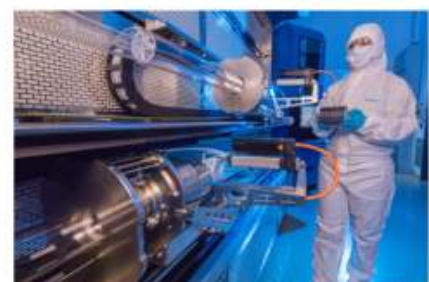
Der Spezialist für directWide-Band Gap Dioden

Anwendungsorientierte Entwicklung von
Gallium Arsenid Leistungshalbleitern

Durchbruchspannungen 400V – 1700V
Stromtragfähigkeit bis 100A pro Chip

Hoher Wirkungsgrad Bestes Preis/
Leistungsverhältnis

Herstellungsverfahren und
Baulemente
Weltweit patentiert



Auf den Spuren schädlicher Metalle bei der Herstellung von Siliziumkristallen

Presseinformation |SYNERGIE| Erlangen, 14.08.2020

Im Verbundprojekt SYNERGIE untersuchten Forscher des Fraunhofer IISB in Erlangen, wie metallische Verunreinigungen in den Siliziumkristall bei dessen Herstellung eingetragen werden. Ein speziell entwickelter Versuchsaufbau ermöglichte dabei zielgerichtete Experimente mit verschiedenen Metallspezies. Im Zusammenspiel mit einem neu implementierten numerischen Simulationsmodell ließen sich die Hauptverunreinigungen und deren Quellen identifizieren. Ebenso ergaben sich neue Erkenntnisse über die Mechanismen, wie die verschiedenen Metallatome während des Herstellungsprozesses in den Kristall eindringen. Die Ergebnisse aus dem Projekt SYNERGIE erlauben direkte Vorhersagen, inwieweit sich die Reinheit der in der Produktion eingesetzten Hilfsstoffe Schmelztiegel, Tiegelbeschichtung und Silizium-Rohstoff auf die elektrische Qualität der Silizium-Wafer auswirkt.



Abb. 1: Herstellung einer Sprühbeschichtung auf einem G1-Tiegel am Fraunhofer IISB im Rahmen des SYNERGIE Projektes
Foto: Kurt Fuchs/Fraunhofer IISB

Siliziumkristalle sind ein wichtiges Grundmaterial für die massenhafte Produktion preisgünstiger Solarzellen. Für die Herstellung der Kristalle wird zunächst Rohsilizium in einem Quarzguttiegel geschmolzen und anschließend kontrolliert abgekühlt. Bei der folgenden Erstarrung der Schmelze bildet sich ein Siliziumkristall mit definierten elektrischen Eigenschaften. Der Quarzguttiegel ist auf der Innenseite mit Siliziumnitrid beschichtet. Diese Beschichtung, basierend auf hochreinem Siliziumnitridpulver (Silzot® SQ), dient unter anderem als Trennschicht und verhindert ein Anhaften des Siliziums am Quarzguttiegel, was beim Erstarren zu Rissen im Siliziumkristall führen würde.

Bei der Produktion der Siliziumkristalle ist das System aus Quarzguttiegel und Beschichtung die größte Quelle für unerwünschte metallische Verunreinigungen. Während der Kristallisation werden kontinuierlich Metallatome in das flüssige und feste Silizium eingetragen. Im Siliziumkristall lagern sie sich an Fehlern an und verschlechtern die Qualität des Kristallmaterials. So sinkt beispielsweise bei den später daraus hergestellten Solarzellen die Stromausbeute und damit der Wirkungsgrad. Die Randbereiche der Siliziumkristalle können sogar derart stark kontaminiert sein, dass diese abgeschnitten werden müssen und sich nicht weiterverwerten lassen. Um nun genauer zu spezifizieren, welche Metalle ausgehend von welcher Quelle in welcher Konzentration in den Siliziumkristall vorliegen, entwickelten die Wissenschaftler am Fraunhofer IISB eine spezielle Versuchsanordnung. Hierbei werden Siliziumwürfel auf eine Unterlage aus verschiedenen Tiegel- und Beschichtungsmaterialien gestellt und gezielt für eine bestimmte Zeit einer hohen Temperatur ausgesetzt. Die Temperatur liegt dabei knapp unterhalb des Silizium-Schmelzpunktes von 1412°C. Eine anschließende chemi-

sche Analyse offenbart, welche Metalle bei der Prozedur in den Siliziumkristall eingedrungen sind. Die Untersuchungen ergaben, dass bei weitem nicht alle Metalle, die in den Unterlagen in hohen Konzentrationen vorkommen, auch später im Siliziumkristall nachweisbar sind. Mit Eisen, Chrom und Cobalt konnten diejenigen Metalle identifiziert werden, die im Siliziumkristall in ausreichend hoher Konzentration vorliegen und somit hauptverantwortlich für den Performance-Verlust von zum Beispiel Solarzellen sind.

Parallel zu den experimentellen Untersuchungen wurde am Fraunhofer IISB ein numerisches Simulationsmodell für die Berechnung der Verteilung der Fremdmetalle im Siliziumkristall entwickelt. Das Modell berücksichtigt den Kontaminationsgrad von Tiegel, Siliziumnitrid-Beschichtung und Silizium-Rohstoff sowie die relevanten Parameter für die Prozessführung. Die Resultate zeigen deutlich, dass eine erhöhte Reinheit aller Hilfsstoffe die Metallkontamination in den Silizium-Kristallen signifikant reduziert, was Kristallqualität und Ausbeute enorm steigern würde. Allerdings stehen vor allem die Quarzguttiegel nicht in beliebiger Qualität zur Verfügung. Ein für die industrielle Produktion praktikabler Weg wären Barrierschichten zwischen Tiegel und Siliziumnitrid-Beschichtung, welche den Austrag von Metallen aus dem Tiegel blockieren.

Die Arbeiten aus dem SYNERGIE-Projekt bieten für industrielle Hersteller von Halbleitermaterialien eine gute Hilfestellung, um zu beurteilen, welche Materialqualität aus dem Einsatz bestimmter Hilfsstoffqualitäten resultiert und worauf sie den Fokus legen müssen, um möglichst effektiv und kostengünstig Verbesserungen zu erzielen. Die neu gewonnenen Erkenntnisse sind dabei generell auf Herstellungsprozesse für Halbleitermaterialien, bei denen Schmelztiegel zum Einsatz kommen, anwendbar.

Das Verbundprojekt SYNERGIE - „Synergetische Weiterentwicklung von Zulieferprodukten zur Reduktion der Herstellungskosten und Steigerung der Materialqualität von kristallinen Siliziumblöcken in der Photovoltaik“ - wurde durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) gefördert. Projektpartner des Fraunhofer IISB waren die Unternehmen AlzChem Group AG und Wacker Chemie AG.

Ansprechpartner:

Christian Reimann

Fraunhofer IISB, Schottkystraße 10, 91058 Erlangen

Tel. +49 9131 761-272 | Fax +49 9131 761-280

christian.reimann@iisb.fraunhofer.de | www.iisb.fraunhofer.de

Hochreine Kristalle für die Spitzenforschung - DESY und das Leibniz-Institut für Kristallzüchtung unterschreiben Kooperationsvertrag

News des IKZ, Berlin, September 2020

DESY und das Leibniz-Institut für Kristallzüchtung (IKZ) werden in Zukunft noch enger zusammenarbeiten – im wahrsten Sinne des Wortes: das Berliner Leibniz-Institut wird auf dem Campus in Hamburg eine Außenstelle einrichten. Letzte Woche haben die beiden Forschungszentren einen Kooperationsvertrag hierzu unterschrieben.



Helmut Dosch und Thomas Schröder beim Corona-konformen „Handschlag“ bei der Unterzeichnung der Kooperationsvereinbarung.
Foto: DESY / Marta Mayer

„Wir bringen so eine Vielzahl anwendungsorientierter Forschungsprojekte näher an die Forschungseinrichtungen bei DESY. Dies wird unsere wissenschaftliche Zusammenarbeit erheblich stimulieren und neue Forschungs- und Innovationsbereiche eröffnen“, so IKZ-Institutsdirektor Thomas Schröder. Der Einsatz von maßgeschneiderten Kristallen ist in der Forschung mit Synchrotronstrahlungsquellen von großer Bedeutung. Sie sind Forschungsgegenstand, Vergleichsobjekt und Trägermaterial und werden in einer Vielzahl von Feldern ein-

gesetzt. Die nun unterzeichnete Kooperationsvereinbarung wird die Forschung an verschiedenen Materialsystemen, z.B. für die Hochleistungselektronik, Informationstechnologie und alternative Energiequellen weiter vorantreiben. Dazu entwickeln Experten bei DESY und IKZ schon jetzt gemeinsam neuartige Messverfahren, mit denen die Materialien der Zukunft mit hoher Zeitauflösung und in Echtzeit untersucht werden. Auch für die geplante Lichtquelle PETRA IV, die extrem hohe Anforderungen an die Materialien und technischen Komponenten stellen wird, können IKZ-produzierte Silizium-Kristalle für Spiegel und Monochromatoren eingesetzt werden.

Darüber hinaus spielt auch die gemeinsame Zusammenarbeit von IKZ und DESY mit der Industrie eine wichtige Rolle; unter anderem ist zum Beispiel die Gründung eines Startup für aktive Röntgenoptiken geplant.

„Wir freuen uns, die führenden Kristallexpert*innen vom IKZ bald direkt auf dem Campus zu haben“, sagt Helmut Dosch, Vorsitzender des DESY-Direktoriums. „Wir versprechen uns erhebliche Synergien von der dichteren räumlichen Anbindung, von der zum Beispiel unsere Expert*innen in Laserforschung- und Entwicklung und das DESY Nanolab besonders profitieren werden.“

Hochtemperaturschutzschichten für die Raumfahrt

Presseinformation, Erlangen, 04.11.2020

Forscher des Fraunhofer IISB in Erlangen belegen bei den diesjährigen INNOspace Masters den 3. Platz in der DLR-Challenge

Dr.-Ing. Christian Reimann und M.Sc. Kevin Schuck vom Fraunhofer IISB in Erlangen belegten den 3. Platz bei der diesjährigen DLR-Challenge des INNOspace-Masters-Wettbewerbs. Prämiert wurde ihre Idee, einfache und kostengünstige Hochtemperaturschutzschichten auf Kohlenstoffkompositwerkstoffen für Luft- und Raumfahrtanwendungen herzustellen.



Dr.-Ing. Christian Reimann (links) und M.Sc. Kevin Schuck (rechts), Gewinner des 3. Platzes der DLR Challenge des diesjährigen „INNOspace Masters“-Wettbewerb. Bild: Anja Grabinger / Fraunhofer IISB

Dr.-Ing. Christian Reimann und Kevin Schuck vom Fraunhofer-Institut für Integrierte Systeme und Bauelementetechnologie IISB in Erlangen wurden für ihre Idee zur Herstellung innovativer Hochtemperaturschutzschichten ausgezeichnet. Herzstück ist dabei die am IISB entwickelte Sprühbeschichtungstechnologie. Diese Technologie ermöglicht es, Bauteile für Luft- und Raumfahrtanwendungen mit ultrahochtemperaturbeständigen Schutzschichten zu versehen. Die INNOspace Masters zeichnen jährlich innovative Ideen und Konzepte für den Transfer von Technologien, Diensten und Anwendungen von der Raumfahrt in andere Branchen – und umgekehrt – aus. Durch die Prämierung bei der DLR-Challenge erhalten die Erlanger Forscher jetzt Zugang zu weltweiten Wissenschaftsnetzwerken. Ebenso ist mit dem 3. Platz eine Förde-

und Adlershof. Die Forschung fokussiert sich auf Materialien für eine nachhaltige Energieversorgung sowie den Betrieb des Elektronenspeicherrings BESSY II. Beides ergänzt sich, denn Fragestellungen aus der Forschung forcieren die Weiterentwicklung der Experimentierumgebung an BESSY II und umgekehrt; die Möglichkeiten, die BESSY II bietet, beschleunigen die Energieforschung enorm.

Das IKZ in Berlin-Adlershof ist ein internationales Kompetenzzentrum für Wissenschaft, Technologie, Service und Transfer im Bereich kristalliner Materialien. Das Forschungs- und Entwicklungs-Spektrum reicht dabei von Themen der

Grundlagen- und Anwendungs-Forschung bis hin zu vorindustriellen Forschungsaufgaben. Das IKZ erarbeitet Innovationen in kristallinen Materialien durch seine Expertise in Anlagenbau, numerischer Simulation und Kristallzüchtung zur Erzielung kristalliner Materialien höchster Qualität und mit maßgeschneiderten Eigenschaften. Das Alleinstellungsmerkmal des Instituts ist die Forschung an Volumenkristallen. Diese Arbeiten werden begleitet durch Forschung und Entwicklung an Nanostrukturen und dünnen Filmen und eine starke theoretische und experimentelle Materialforschung.

DGKK-Personen

Prof. Darrell G. Schlom als Leibniz-Chair ans Leibniz-Institut für Kristallzüchtung (IKZ) berufen

News des IKZ, Berlin, Juli 2020

Der Herbert Fisk Johnson Professor für industrielle Chemie an der Cornell Universität, Darrell G. Schlom, arbeitet bereits seit vielen Jahren mit dem IKZ auf international führendem Niveau zusammen. Nun erhält der herausragende Wissenschaftler auf dem Gebiet der Perowskitkristalle den Leibniz-Chair am Leibniz-Institut für Kristallzüchtung.



Bereits seit der Institutsgründung im Jahre 1992 beschäftigt sich das IKZ mit dem Thema Perowskitkristalle. Im Rahmen eines gemeinsamen Forschungsprojektes kam Darrell Schlom vor fast 20 Jahren auf die Idee, zusammen mit dem IKZ an Seltenerdscandat-Substratkristalle (RE-ScO_3) mit Perowskitstruktur zu for-

schren. Diese neuartigen Substratkristalle sollten es erstmals ermöglichen „Strain Engineering“ in der „Oxidwelt“ zu etablieren, um neuartige Materialeigenschaften in Dünnschicht- und Heterostrukturen zu erforschen. Dieses Ziel gelang bereits nach wenigen Jahren intensiver Zusammenarbeit und wurde 2002 im Rahmen einer gemeinsamen Nature-Publikation der Fachwelt vorgestellt mit mittlerweile sehr hoher Zitationszahl.

Aus diesen Arbeiten entstand am IKZ eine wichtige F&E Aktivität, die die Arbeiten einer weltweiten Forschungs-„community“ mittels nicht-kommerziell verfügbarer Kristalle überhaupt erst ermöglicht. Die gemeinsame Forschung zwischen Darrell Schlom und dem IKZ beschränkte sich in den folgenden Jahren nicht allein auf Scandate, viele weitere Perowskite,

Pyrochlore und andere Oxide kamen über die Jahre hinzu und führten zu 35 gemeinsamen Publikationen in referierten Zeitschriften, darunter zahlreiche Artikel in Science oder Nature.

Eine weltweite akademische Forschungslandschaft (siehe z.B. die internationale Konferenzserie „Workshop on Oxid Electronics (WOE)“) ist entstanden und das IKZ wurde gemäß seiner Leibniz-Mission, exzellente Forschung durch die Bereitstellung nicht-kommerziell verfügbarer Spezialkristalle zu ermöglichen, zur zentralen F&E Plattform für die steigenden Kristallanforderungen dieser spannenden 'Community'. Prof. Schlom ist an der Cornell University im Department Materials Science and Engineering mit Fokus auf Heteroepitaxie von Oxidschichten unter Verwendung der Molekularstrahl-Epitaxie (MBE) tätig. Insbesondere der Ansatz „materials-by-design“ zeichnet seine Arbeiten aus und führt regelmäßig zur Entdeckung von Materialien mit überragenden Eigenschaften. Er ist derzeit Direktor der NSF-Plattform PARADIM (Platform for the Accelerated Realization, Analysis, and Discovery of Interface Materials) und Herbert Fisk Johnson Professor für industrielle Chemie. Neben dem Frank-Preis und dem Humboldt-Forschungspreis erhielt er 2008 die MRS-Medaille, 2004 den SRC-Preis und 2001 den Penn State Wilson Preis. Sieben weitere Auszeichnungen erhielt er zwischen 1989 und 1999, darunter einen Erfindungspreis von IBM.

IKZ-Forscher Dr. Christian Kränkel zum OSA Fellow gewählt

News des IKZ, Berlin, 8.10.2020

Christian Kränkel, Leiter des Zentrums für Lasermaterialien am Leibniz-Institut für Kristallzüchtung (IKZ), ist für seine Forschung an neuen Lasermaterialien am 08.10.2020 zum Fellow der Optical Society OSA gewählt worden.



Foto: Tina Merkau

Mit mehr als 20.000 Mitgliedern in über 100 Ländern ist die 1916 gegründete Optical Society die führende Gemeinschaft von Wissenschaftlern im Feld der Optik und Photonik. Jährlich wird eine streng begrenzte Anzahl von Mitgliedern, die sich über einen längeren Zeitraum durch hervorragende Leistungen im Bereich der Forschung und Förderung der Optik und Photonik ausgezeichnet haben, in den Stand des OSA Fellows erhoben.

Die Auszeichnung von Christian Kränkel erfolgte für seine Beiträge zur Entwicklung neuer, maßgeschneiderter Seltenerd-dotierter Kristalle für Festkörperlaser im sichtbaren sowie im nahen und mittleren infraroten Spektralbereich. Insbesondere seine Arbeiten zur Züchtung und Charakterisierung

Yb-dotierter Sesquioxidkristalle ermöglichten verschiedene wissenschaftliche Durchbrüche, darunter den ersten modenkoppelten Laserresonator mit einer mittleren Ausgangsleistung von mehr als 100 W. Neben seinen Arbeiten mit Lasermaterialien für den infraroten Spektralbereich zählt Christian Kränkel auch zu den weltweit führenden Forschern im Bereich der direkt sichtbar emittierenden Festkörperlaser basierend auf Pr^{3+} - und Tb^{3+} -dotierten Fluoridkristallen. Zudem engagiert er sich seit vielen Jahren als Komiteemitglied verschiedener, von der OSA ausgerichteter Konferenzen und ist Associate Editor beim renommierten Journal „Optics Express“.

Nach seiner Promotion an der Universität Hamburg und einem PostDoc-Aufenthalt an der ETH Zürich forschte und lehrte der habilitierte Physiker als Nachwuchsgruppenleiter am Institut für Laser-Physik der Universität Hamburg. Seit 2017 setzt er als Leiter des Zentrums für Lasermaterialien seine Forschung am IKZ erfolgreich fort und betätigt sich in der Lehre an der Humboldt-Universität zu Berlin.



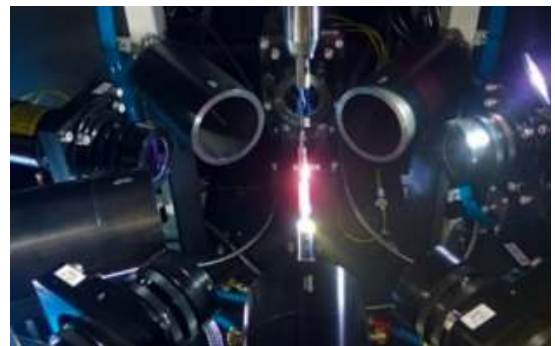
Quantum Design
EUROPE

qd-europe.com

Innovativer Schmelzzonenofen mit Diodenlaser für die Kristallzucht

Die ideale Lösung auch für schwierig zu erzeugende Kristalle

- Geeignet für Temperaturen bis zu 3.000 °C
- Exzellente Homogenität der eingestrahlten Energie
- Strahlprofile sind für die Kristallzucht optimiert
- Temperaturmessung und Steuerung in Echtzeit



Sr_2RuO_4



Rubin, $T_m \sim 2072 \text{ °C}$



SmB_6 , $T_m \sim 2345 \text{ °C}$



YIG, $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$

Über die DGKK

Die Deutsche Gesellschaft für Kristallwachstum und Kristallzüchtung (DGKK) ist eine gemeinnützige Organisation zur Förderung der Forschung, Lehre und Technologie auf dem Gebiet des Kristallwachstums und der Kristallzüchtung. Sie vertritt die Interessen ihrer Mitglieder auf nationaler und internationaler Ebene.

Die DGKK ist Mitglied der Bundesvereinigung Materialwissenschaft und Werkstofftechnik e.V. (BV MatWerk). Die DGKK veranstaltet jährlich die Deutsche Kristallzüchtungstagung, gibt zweimal jährlich das DGKK-Mitteilungsblatt heraus und unterhält eine Web-Seite (www.dgkk.de). Die Arbeit der Gesellschaft ist in Arbeitskreisen organisiert.

1. Vorsitzender

Prof. Dr. Andreas N. Danilewsky
Kristallographie
Institut für Geo- und Umweltwissenschaften
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg
Hermann-Herder-Str. 5, 79104 Freiburg
Tel.: 0761 / 203 - 6450
E-Mail: a.danilewsky@krist.uni-freiburg.de

2. Vorsitzender

Prof. Dr. Andreas Erb
Walther-Meißner-Institut für Tieftemperaturphysik
der Bayerischen Akademie der Wissenschaften
Walther-Meißner-Straße 8, 85748 Garching
Tel.: (089) 2891 4228
E-Mail: andreas.erb@wmi.badw.de

Schatzmeister

Prof. Dr. Peter Wellmann
Institut für Werkstoffwissenschaften 6
Friedrich-Alexander-Universität (FAU)
Martensstr. 7, 91058 Erlangen
Tel.: 09131 / 85 27635
Fax: 09131 / 85 28495
E-Mail: peter.wellmann@fau.de

Schriftführerin

Dr. Christiane Frank-Rotsch
Leibniz-Institut für Kristallzüchtung (IKZ)
Max-Born-Str.2, 12489 Berlin
Tel.: 030 / 6392 3031
Fax: 030 / 6392 3003
E-Mail: christiane.frank-rotsch@ikz-berlin.de

Redaktion:

Dr. Klaus Böttcher
Leibniz-Institut für Kristallzüchtung (IKZ)
Tel.: 030 / 6392 3073
Fax: 030 / 6392 3003
E-Mail: redaktion@dgkk.de

Anzeigen:

Dr. Ulrike Wunderwald
Fraunhofer Technologiezentrum Halbleitermaterialien
(THM)
Tel.: 03731 / 2033-101
E-Mail: ulrike.wunderwald@iisb.fraunhofer.de

Nachrichten der DGKK, Stellenangebote, Stellengesuche:

Dr. Christiane Frank-Rotsch
Leibniz-Institut für Kristallzüchtung (IKZ)
Tel.: 030 / 6392 3031
Fax: 030 / 6392 3003
E-Mail: christiane.frank-rotsch@ikz-berlin.de

Redaktionsschluss:

15. Dezember 2020
ISSN 2193-374X (Druck)
ISSN 2193-3758 (Internet)
Gesetzt mit pdfL^AT_EX.

Beisitzer

Dr. Ulrike Wunderwald
Fraunhofer Technologiezentrum Halbleitermaterialien
(THM)
Am St.-Niclas-Schacht 13, 09599 Freiberg
Tel.: 03731 / 2033-101
E-Mail: ulrike.wunderwald@iisb.fraunhofer.de

Dr. Ludwig Stockmeier
Siltronic AG
Berthelsdorfer Straße 113, 09599 Freiberg
Tel.: 03731 / 278-7295
E-Mail: ludwig.stockmeier@siltronic.com

Dr. Götz Meisterernst
Siltronic AG
Johannes-Hess-Straße 24, 84489 Burghausen
Tel.: 08677/ 83 - 3930
E-Mail: goetz.meisterernst@siltronic.com

Bankverbindung:

Sparkasse Karlsruhe
Kto.-Nr.: 104 306 19
BLZ: 660 501 01
IBAN DE84 6605 0101 0010 4306 19
SWIFT-BIC: KARSDE66

Internetredaktion:

Die Internetredaktion setzt sich gegenwärtig aus der Schriftführerin, der Webmasterin und dem Redaktionsteam des Mitteilungsblattes zusammen.

E-Mail: internet.redaktion@dgkk.de

Leibniz-Institut für Kristallzüchtung (IKZ)
Tel.: 030 / 6392 3093
E-Mail: webmaster@dgkk.de
WWW: <http://www.dgkk.de>

Mitgliedschaft:

Der Mitgliedsbeitrag kostet zur Zeit im Jahr 30 € und für Studenten ermäßigt 20 €. Beiträge für juristische Personen erhalten Sie auf Anfrage. Sie können sich über die Internetseite der DGKK online anmelden. Dort finden Sie auch die DGKK Stichwortliste.

Anzeigenpreise:

Die Anzeigenpreise gelten pro Anzeige in Abhängigkeit von der Größe und sind Brutto-Preise. Bitte wenden Sie sich bei Interesse an die Redaktion.

Anzahl Anzeigen	DGKK-Mitglieder		Nicht-Mitglieder	
	1/1 Seite	1/2 Seite	1/1 Seite	1/2 Seite
1	288,00 €	135,00 €	320,00 €	150,00 €
4	234,00 €	108,00 €	260,00 €	120,00 €

Feedback furnace

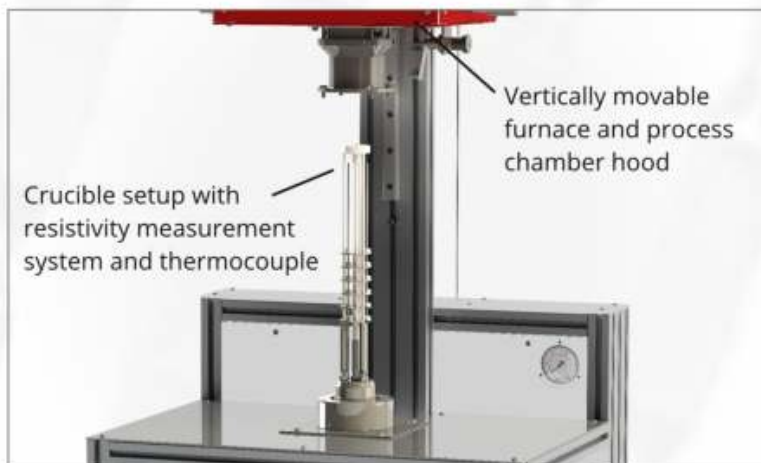
Novel equipment for flux crystal growth:
Direct process control by in-situ detection of phase transitions

Heating power of the furnace is directly linked to conversion processes in the sample material:

- Detect crystallization onset by latent heat monitoring directly from the solution
- Perform seed selection by temperature oscillation at the crystallization point
- Suppress supercooling and uncontrolled crystallization

Technical specifications in the standard configuration:

- Max. temperature: 1300 °C
- Max. crucible dimensions: d = 25 mm, h = 50 mm
- Precise sample temperature monitoring by lock-in amplified resistivity measurements AND thermocouples
- Automatic detection of temperature anomalies down to 10^{-4} abs(T)
- Fully computer-controlled and automatable via GUI or python scripts
- Vacuum and gas connections
- Comfortable crucible installation due to a vertically movable furnace hood



A high-precision measurement system directly detects ongoing crystallization during flux growth by the onset of characteristic signatures in the temperature profile of the sample. This signal is caused by the latent heat associated with the phase transition. The in-situ detection of nucleation allows to significantly reduce the relevant temperature regime and enhances the applicability of lower cooling rates than previously practical. The feedback furnace combines crystal growth with a thermal analysis of the sample material to provide a powerful instrument for the creation of heretofore poorly studied multicomponent compounds.



SCIDRE
SCIENTIFIC INSTRUMENTS DRESDEN GMBH

High Pure Metals and Inorganics
Rare Earth Metals and Compounds
Precious Metals and Compounds
Organometallics
Precious Metals Catalysts
Sputtering Targets
Evaporation Materials
Laboratory Equipment
Nanopowders
Customized Synthesis



chemPUR

Ihr Partner für Chemie & Physik

Wir schaffen Verbindungen



- individueller Service
- bezugsnahe Betreuung
- fachkundige Beratung
- enge Zusammenarbeit
- zertifiziert nach
ISO 9001:2008

ChemPur Feinchemikalien und Forschungsbedarf GmbH
Rüppurrer Straße 92 Tel.: + 49 (0) 7 21 - 9 33 81 40
D-76137 Karlsruhe info@chempur.de

www.chempur.de