

Neue Materialien sind im Kontext der Energiewende unverzichtbar und teils bereits in größeren Mengen vorhanden, scheitern allerdings oftmals an der Verarbeitung. In diesem Artikel werden Hintergründe erklärt, die Problematik beschrieben und Lösungswege aufgezeigt. Zuletzt gibt dieser Artikel einen kurzen Überblick, wie bessere und in größerer Menge vorliegende Daten, kombiniert mit deren Analyse, die sich von statistischen Methoden bis zu maschinellem Lernen erstreckt, helfen, neue Prozesse für neue Materialien zu entwickeln.

Pastös und alles andere als langweilig!

Neue Materialien in neuen Anwendungen

Von Doris Segets

Motivation: Neue Materialien in neuen Anwendungen – woran hapert es?

Ohne neue Materialien, die aus ungiftigen und verfügbaren Elementen bestehen und in technisch relevanten Maßstäben herstellbar und verarbeitbar sind, kann die Energiewende nicht gelingen. Dies beinhaltet zum Beispiel leistungsfähige Anodenmaterialien für Batterien auf Siliziumbasis oder platinfreie Elektrokatalysatoren für Elektrolyseure und Brennstoffzellen. All dies sind Aufgaben die den Einsatz von Nanomaterialien (d.h. viel

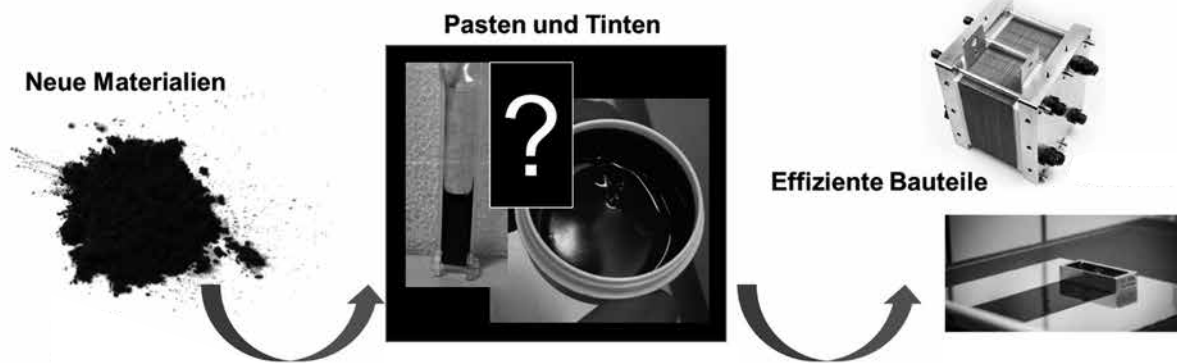
Oberfläche!) erfordern und durch Chemiker*innen und Materialwissenschaftler*innen gelöst werden können, beziehungsweise teilweise im Labormaßstab sogar schon gelöst wurden. Die Materialien selbst sind üblicherweise vollständig charakterisiert, das heißt die Größe und (Nano-)Partikelform/-morphologie sind bekannt, genauso die elementare Zusammensetzung bis zur atomaren Anordnung der Elemente innerhalb einer Struktur.

Auf der anderen Seite werden aus diesen neuen Materialien sogenannte Devices wie Elektrolyseure, Brennstoffzellen oder Batterien

hergestellt. Diese bestehen aus übereinander angeordneten Schichten unterschiedlicher (neuer und/oder alter) Nanomaterialien. Die Leistungsfähigkeit eines solchen Devices wiederum ist ebenfalls bekannt und wird üblicherweise umfassend charakterisiert. Sowohl hinsichtlich der Maximalwerte (z.B. Effizienz einer Brennstoffzelle, Kapazität einer Batterie) als auch mit Blick auf die Stabilität im Betrieb (Alterungstests) und post-mortem Analysen, um die Ursachen für Degradation zu identifizieren. Die hierbei zum Einsatz kommenden Untersuchungen haben oft einen hohen Grad an Standardi-



Doris Segets. Foto: Vladimir Unkovic



(1) Blackbox. Links: Neue Materialien als Nanopulver; Mitte: Schwarze Tinten und Pasten; rechts: Devices.
 Quellen: Foto links: Adil Amin; Fotos Mitte: Shalmali Bapat, Fatih Özcan; Foto rechts oben: Zentrum für BrennstoffzellenTechnik GmbH,
 Foto rechts unten: Arbeitsgruppe Hartmut Wiggers, UDE

sierung erreicht und erlauben daher den Vergleich über verschiedene Labore und Forschungseinrichtungen hinweg.

Widmet man sich nun allerdings der Frage wie das – üblicherweise als Pulver vorliegende – neue Material in eine dünne Schicht (bis zu weniger als ein millionstel Meter dick!) kommt, wird es schwierig. Im einfachsten Fall gelingt dies durch Anrühren einer Tinte oder Paste die im nächsten Schritt auf eine leitfähige Unterlage (*Substrat*) gedruckt oder über ein entsprechendes Beschichtungsverfahren aufgebracht wird. Hier ist jedem, der schon einmal eine Ink-Jet Druckerpatrone gereinigt, eine Wand frisch gestrichen oder einen Kuchenteig ausgerollt hat, klar, dass Faktoren wie Klümpchenbildung, Haftung, Deckkraft sowie Klebrigkeit und die Neigung zur Rissbildung eine Rolle spielen. All diese Eigenschaften werden durch das Zusammenspiel der, in diesem Fall festen *Partikel* (z.B. Pigmente oder Zucker- und Mehlteilchen, um bei der „Kuchenanalogie“ zu bleiben) und der umgebenden kontinuierlichen Phase (z.B. Wasser, Ei-Milch-Gemisch) und der weiteren Verarbeitung bestimmt (z.B. Aufrühren der Wandfarbe und Auftrags-

verfahren, z.B. Pinsel vs. Rolle; Leistungsfähigkeit der Küchenmaschine und Dauer des Ausrollens von „klebrigem“ Plätzchenteig). Bricht man diese Fragestellungen auf die Verarbeitung der hier angeführten, neuen Materialien herunter, zeigt sich, dass Tests mit vergleichbarem Erkenntnisgewinn – wie dies auf der Ebene der Pulver und der Ebene der Bauteile möglich ist – schlicht nicht existieren. Dadurch, dass im Fall der hier angeführten Anwendungen meist Kohlenstoffmaterialien mit involviert sind, das heißt im weitesten Sinne Ruß, handelt es sich wortwörtlich um eine maximal undefinierte „Blackbox“, die zwischen neuen Materialien und deren Anwendungen steht (Abb. 1). Diese wird im besten Fall „erfahrungsbasiert“ und im ungünstigsten Fall mittels „Trial-and-Error“ adressiert. Und ist damit ein wesentlicher Faktor, der die dringend benötigte, beschleunigte Überführung leistungsfähiger Pulver „aus dem Labor“ in industrielle Produkte verhindert.

Die Lücke die es daher zu schließen gilt, ist es, zielgerichtete, idealerweise *wissensbasierte* Ansätze für die Verarbeitung und Überführung neuer Materialien in funktionale Schichten zu entwickeln. „Wild“

im Sinne des Titels dieser Ausgabe, wenn nicht sogar „vogelwild“, ist hier der Parameterraum, der durch konventionelle Ansätze nicht zu beherrschen ist und es erforderlich macht, dorthin zu gehen, „wo es wehtut“: Mehrkomponentige Multimaterialsysteme mit undefinierter Partikelform und -größe bei hohen, technisch relevanten Konzentrationen.

Im Folgenden sollen zunächst die Grundlagen am Beispiel des einfachen, üblicherweise stark verdünnten Modellsystems erläutert werden. Anhand dessen gelingt es im nächsten Schritt, die *Komplexität der benötigten, technisch relevanten Systeme* zu verdeutlichen. Darauf aufbauend sollen im letzten Teil erste *Lösungsansätze* aus der aktuellen Forschung meiner Arbeitsgruppe abgeleitet und ein kurzer Ausblick gegeben werden.

1. Was ist die Aufgabe (der einfache Fall)?

Um die zugrundeliegende Komplexität zu verdeutlichen, soll im Folgenden zunächst darauf eingegangen werden, warum sich Partikel zu größeren Verbänden zusammenlagern. Dies ist im Fall der Pigmente in der Druckertinte und der Verarbeitung

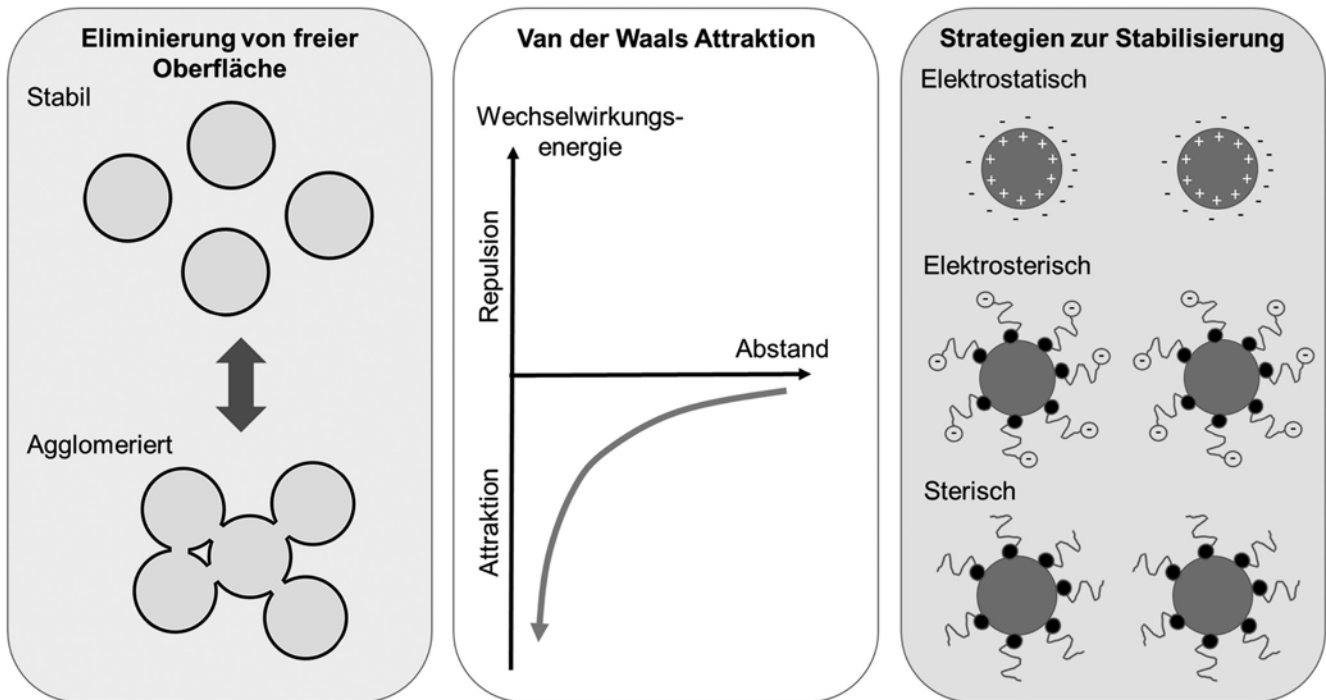
von neuen Materialien eher unerwünscht, im Gegenzug, beispielsweise im Fall der Abwasserreinigung durch das Ausflocken der *Schwebeteilchen* allerdings durchaus angestrebt. Das heißt, es geht in erster Linie darum, das Verhalten eines gegebenen Systems zu kontrollieren und gezielt einzustellen.

Der erste Aspekt, nämlich die Ursache für die Zusammenlagerung, die sogenannte *Agglomeration*, lässt sich vergleichsweise schnell klären (Abb. 2, links). Durch Agglomeration wird energetisch ungünstige Oberfläche eliminiert. Der zweite Aspekt, nämlich wie sich dieses Verhalten steuern lässt, ist wesentlich komplexer. Hier gilt es zunächst, sich vor Augen zu halten, dass nicht nur im Weltall, wo der Mond um die Erde und die Erde um die Sonne kreisen und dabei durch anziehende Kräfte in der Umlaufbahn gehalten werden, sondern auch bei Partikeln anziehende Kräfte existieren. Aus Erfahrung wissen wir, dass diese immer vorhandenen *van*

der Waals-Wechselwirkungen in unserem Alltag bei „sichtbaren“ Teilchen (wie z.B. Billardkugeln im cm-Maßstab) keine nennenswerten Effekte hervorrufen. Dies liegt daran, dass aufgrund der großen Masse der Teilchen die Gewichtskraft (=Masse*Erdbeschleunigung) der entscheidende Faktor ist und das makroskopische Verhalten ganz entscheidend bestimmt. Eine Stahlkugel im Wasserglas sinkt unweigerlich nach unten und zwei Billardkugeln bleiben ohne Effet-Spiel niemals aneinanderhaften, sondern prallen stets voneinander ab.

Werden Partikel nun kleiner und erreichen den µm- (0.000001 m) oder sogar den nm-Bereich (0.000000001 m), tritt der Einfluss der Gewichtskraft immer mehr in den Hintergrund. Im Fall der Stahlkugel in Wasser kommt es nicht mehr zur Sedimentation sondern das Teilchen *diffundiert*. Das heißt es vollzieht eine vollkommen stochastische, sogenannte *Brown'sche Bewegung*¹, hervorgerufen durch *thermi-*

sche Energie. Letztere kann man sich als permanente molekulare Schubser durch die unsere Stahlkugel umgebenden Wassermoleküle vorstellen. Gleichzeitig kommt es, wenn derart kleine Teilchen sich nahekomen, zu den bereits erwähnten, attraktiven Wechselwirkungen. Um im Bild zu bleiben, können diese sich ähnlich auswirken, wie wenn ein Satellit in die Umlaufbahn eines Planeten gerät und abstürzt. Denn, wie in Abbildung (2), Mitte, gezeigt: je geringer der Abstand zwischen den Teilchen, umso stärker die Anziehung. Das heißt, bewegen sich viele kleine Partikel stochastisch in einer Flüssigkeit und kommen sich dabei nahe, führt dies ab dem Unterschreiten eines bestimmten Mindestabstands unweigerlich zur Kollision mit nachfolgendem Aneinanderhaftenbleiben. Tritt diese Agglomeration bei den eingangs erwähnten „Abwasser-schwebeteilchen“ auf, können die dadurch entstehenden, größeren Verbände leicht abgetrennt werden. Geschieht dies im Fall der Drucker-



(2) Links: Visualisierung der eliminierten Oberfläche; Mitte: Wechselwirkungen (van der Waals); rechts: Mechanismus der elektrostatischen, der elektrosterischen und der sterischen Stabilisierung. Quelle: eigene Darstellung

tinte, kommt es zur Verstopfung des Druckkopfs. Das heißt im ersten Fall ist es das Ziel, das System gezielt zu destabilisieren und Agglomeration zu begünstigen, im zweiten Fall muss diese soweit als möglich unterdrückt werden.

Nun stellt sich aus Sicht der Ingenieur*in natürlich die Frage, wie es gelingt, dieses Verhalten entweder gezielt zu fördern oder zu verhindern? Die Antwort lautet interessanterweise durch genau dieselbe Strategie, die wir alle im Corona-Jahr 2020 kennenlernen „durften“, durch *Distancing*: die Teilchen müssen auf Abstand gehalten werden. Gelingt dies, kommen sie sich nicht hinreichend nahe, dass van der Waals-Kräfte ihre volle Wirkkraft entfalten können. Abbildung (2) rechts zeigt die Möglichkeiten. Die erste und oftmals in der Praxis gewählte Option ist die elektrostatische Stabilisierung (A). Das heißt gleichnamige Ladungen führen zu einem osmotischen Druck zwischen den Partikeln und es kommt zur Abstoßung. Neben dieser sogenannten *elektrostatischen Stabilisierung* ist die *sterische Stabilisierung* eine weitere Möglichkeit. Hier werden größere Moleküle auf der Partikeloberfläche aufgebracht die, bei einer geschickten Wahl des richtigen Lösemittels (der bereits erwähnten *kontinuierlichen* Phase) als Abstandshalter dienen (B). Zuletzt sei die *elektrosterische Stabilisierung* als äußerst effiziente Mischform zu nennen, bei der sowohl durch molekulare Abstandshalter als auch durch Ladungen stabilisiert wird (C).

Verdünnte Systeme die im Idealfall aus nur einer Komponente bestehen, die noch dazu kugelförmig ist (z.B. Stahlkugeln in Wasser), haben nun einige entscheidende Vorteile:

- Mit zum Beispiel auf Lichtstreuung basierenden Verfahren (weit verbreitet und relativ kostengünstig) kann die Änderung der Partikelgrößenverteilung im zeitlichen Verlauf experimentell untersucht werden. So lässt sich der Zeitpunkt, ab wann Agglomeration einsetzt und wie stark diese

ausgeprägt ist, eindeutig bestimmen und quantitativ einordnen.

- Die gewonnenen Ergebnisse können mit physikalischen Modellen, die insbesondere für das Wechselspiel aus van der Waals-Anziehung und elektrostatischer Abstoßung existieren (sog. *DLVO-Theorie*), beschrieben werden.

- Dadurch kann der Zustand des Systems gezielt eingestellt werden, zum Beispiel durch Anpassung der Temperatur (Auswirkung auf den Transport), die Partikelkonzentration (Anzahl der potentiellen Zusammenstöße/Zeit durch Änderung des mittleren Abstands) und die Zusammensetzung der kontinuierlichen Phase (Ladung, Ausdehnung der Abstandshalter ins Medium).

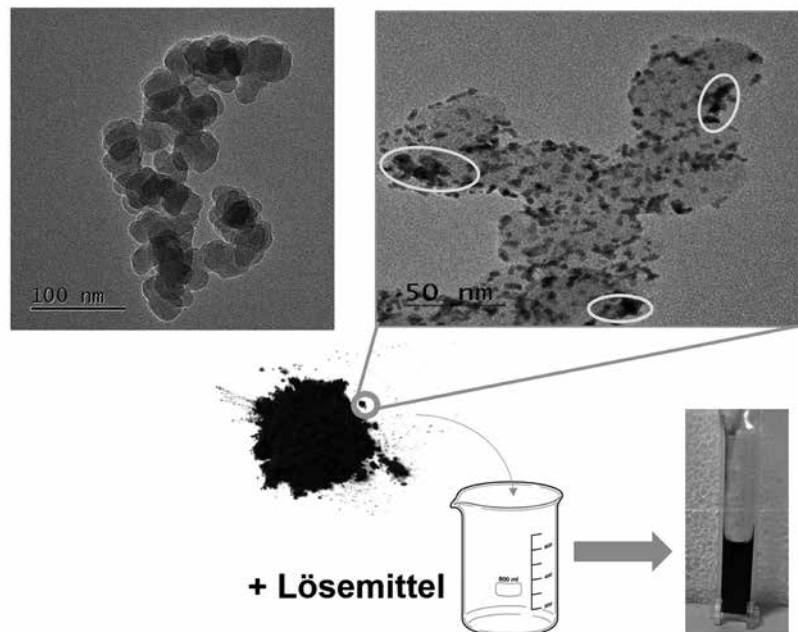
Während dies zunächst nach einem gelösten Problem klingt, gestaltet sich die praktische Umsetzung mindestens als „schwierig“. Denn in der Praxis...

- ... sind die zu stabilisierenden Teilchen nicht sphärisch, sondern besitzen im Bestfall eine undefinierte

„Kartoffelform“. Oft kommen die Partikel sogar aus einem Verbrennungsprozess und sind zu fraktalen Verbänden zusammengeschmolzen (Abb. 3, links).

- ... bestehen die zu stabilisierenden Teilchen im Fall von Materialien für die Elektrokatalyse (d.h. Brennstoffzellen oder Elektrolyseure) nicht nur aus einem Material, sondern einem Materialverbund, zum Beispiel kleinen Platinnanopartikeln (<10 nm) die auf größeren, leitfähigen Trägerpartikeln (~1 µm) aus Kohlenstoff abgeschieden sind.

- ... befindet sich nicht nur ein Partikelmaterial in der Tinte oder Paste sondern sind weitere Komponenten, sogenannte *Additive* vorhanden: Beispielsweise Binderpartikel, die später für einen besseren Zusammenhalt in der Schicht sorgen oder Additive, die spezifische Eigenschaften nochmals verbessern. Dies sind zum Beispiel die Leitfähigkeit in der Schicht oder die Stabilität gegenüber elektrochemischen Alterungsprozessen. Insbesondere diese Alterungsprozesse



(3) Oben: typische Aktivmaterialien für Batterieanoden (links) und Kathoden-Katalysator-Schichten für Brennstoffzellen (rechts); Mitte: zu prozessierendes Katalysatorpulver; unten rechts: zu analysierende, schwarze Tinte.

Quellen: Oben: Arbeitsgruppe Hartmut Wiggers und Bapat & Segets, 2020 (Copyright American Chemical Society); Mitte: Adil Amin; unten: Shalmali Bapat

führen oft zu einer völligen, oft sehr schnellen Selbstzerstörung des Materials im Betrieb.

- ... sind die für die spätere Anwendung benötigten Konzentrationen so groß, dass streulichtbasierte Messverfahren nicht mehr anwendbar sind (Abb. 3, rechts).

Auch für Nicht-Expert*innen dürfte durch diesen kurzen Abriss klar geworden sein, dass weder die bestehenden physikalischen Modelle auf diese realen Systeme anwendbar sind, noch dass es ohne erheblichen Aufwand möglich ist, die Vorgänge innerhalb solcher Tinten messtechnisch zu erfassen. Letzteres ist allerdings notwendig, um die Antwort einer solchen „Blackbox“ auf äußere Einflüsse (z.B. Partikelkonzentration, Temperatur, Beanspruchung/Energieeintrag während des Weiterverarbeitungsprozesses und insbesondere während der Beschichtung, Zugabe von Additiven) zunächst zu verstehen, im Anschluss mit der Performance unterschiedlicher Tinten/Pasten im Device zu verbinden, und zuletzt prädiktive Modelle abzuleiten.

2. Was können wir tun?

Ziel der in meiner Arbeitsgruppe durchgeführten Arbeiten ist es, diese Problematik aufzulösen und Licht ins Dunkel zu bringen. Im Idealfall gelingt es, nicht nur empirische, sondern wissensbasierte, das heißt rigorose Modelle basierend auf physikalischen und chemischen Eigenschaften sowie dem in erster Linie durch den gewählten Prozess definierten Stoff- und Wärmetransport zu entwickeln. Diese erlauben es, Zielgrößen für Formulierungen zunächst zu definieren und im nächsten Schritt zu steuern. So würde eine echte *Formulation Science* im Sinne von Wissenschaft (im Gegensatz zu erfahrungsbasiertem Ausprobieren) ermöglicht.

Es existieren bereits in einem einzigen Bereich (z.B. Energiematerialien, optische Materialien) zig Tausende neuer Nanomaterialien. Diese müssen wiederum in Kombi-

nation mit zahlreichen Lösemitteln, Additiven und Stabilisatoren getestet und hinsichtlich ihrer Performance evaluiert werden. Und für jede Kombination stellen die eingestellten Konzentrationen und relativen Verhältnisse zueinander weitere Stellschrauben dar, die untersucht und schlussendlich optimiert werden müssen. Dem gegenüber steht allerdings eine experimentelle Realität, in der nur in einem äußerst begrenzten Maß vergleichbare Daten verfügbar sind. Sei es, weil diese der Geheimhaltung unterliegen, weil die Experimente teuer und/oder aufwendig sind und spezielles Equipment beziehungsweise Know-how erfordern², oder weil deren Einordnung und Vergleichbarkeit aufgrund von nicht hinreichend definierten Randbedingungen nicht beziehungsweise nur schwer möglich ist.

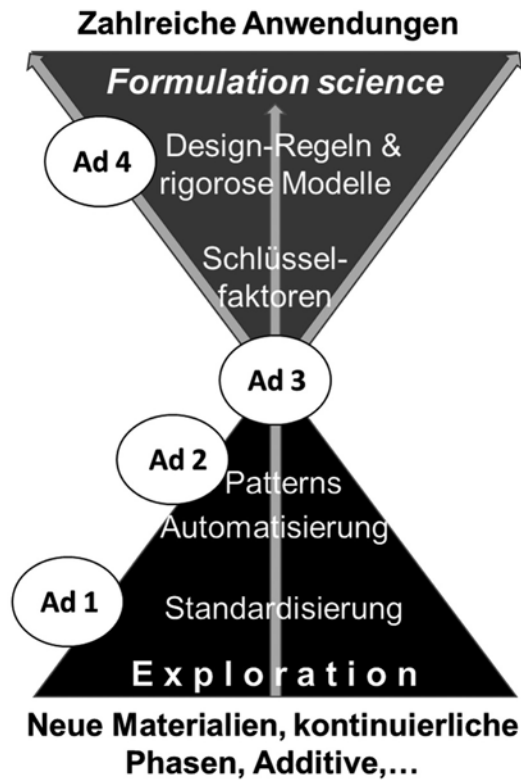
Dies bedeutet konkret (Abb. 4): Ad1: Wir benötigen Standards und

klar definierte und im Idealfall automatisierbare Prozeduren vom Pulver zur Tinte oder Paste und von der Tinte oder Paste zur funktionalen Elektroden-schicht.

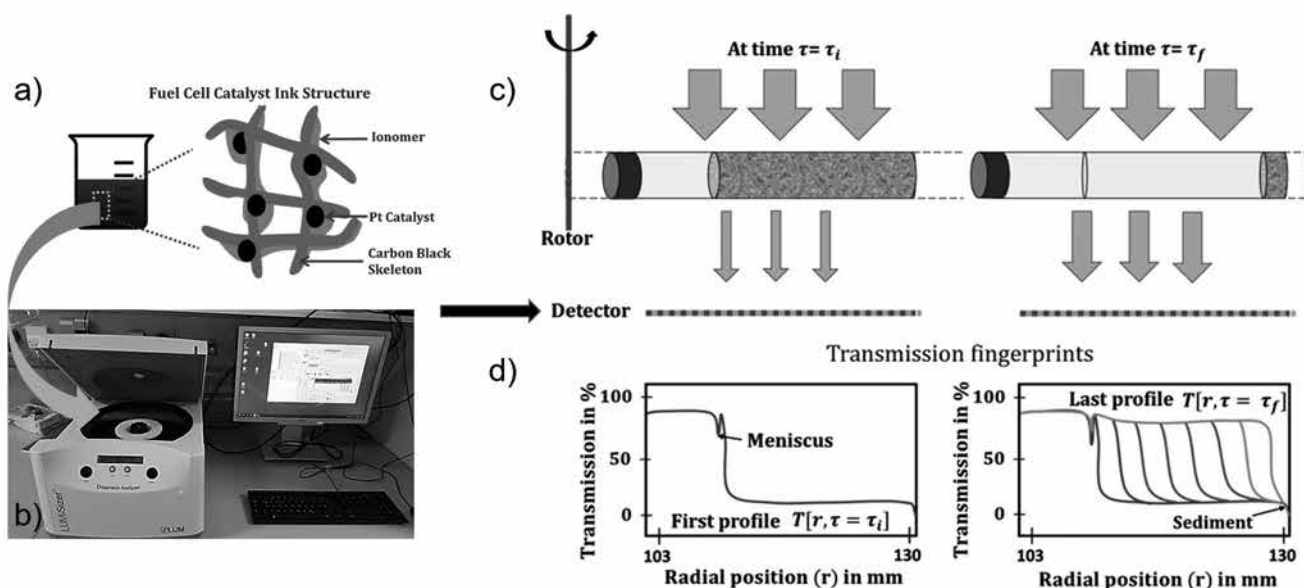
Ad2: Hier muss es das Ziel sein, die Datenlage soweit zu verbessern, dass aus dem aktuell vorhanden „small data“ mindestens ein „less small data“ oder „bigger data“ extrahiert werden kann³.

Ad3: Aus dem erreichbaren „less small“ or „bigger data“ gilt es, die relevanten Parameter zu visualisieren und die entscheidenden physikalisch-chemischen Einflussfaktoren zu identifizieren.

Ad4: Basierend auf dem dadurch erreichten Verständnis der relevanten Parameter erfolgt die Formulierung von physikalisch und chemisch fundierten Modellen unter Berücksichtigung des Stoff- und Wärmetransports sowie den apparativen Randbedingungen, sowie⁴.



(4) Ansatz für den Übergang von empirischer Rezeptexploration hin zu echter „Formulation Science“. Quelle: eigene Darstellung



(5) a) Typische Tinte für Brennstoffzelektroden; b) Analytische Zentrifuge; c) Messung mit d) Fingerprints.

Quellen: Copyright American Chemical Society und Fatih Özcan

Während diese Aspekte teilweise parallel angegangen werden können, gilt es jedoch zunächst Ad1 zu adressieren: Zugang zu den bislang unzugänglichen Blackboxen zu schaffen und darauf aufbauend die Entwicklung von Standards voranzutreiben. Gute Standards sind daran zu erkennen, dass sie einen quantitativen Vergleich unterschiedlicher Formulierungen von Tinten und Pasten ermöglichen. Im letzten Teil dieses Beitrags soll das hierfür entwickelte Vorgehen anhand der Charakterisierung von Tinten und Pasten für Brennstoffzelektroden beschrieben werden⁵.

3. Fallbeispiel: Eine erste Aufklärung der Blackbox durch Transmittogramme

Aus der bisherigen Diskussion wird klar, dass eine gute und möglichst umfangreiche Charakterisierung der hergestellten Tinten für alle weiteren Schritte eine zentrale Rolle spielt. Aufgrund der in Kapitel 2 diskutierten Problematik scheiden viele Methoden zur Charakterisierung von dispersen Systemen aus oder sind extrem aufwendig. Als Alterna-

tive bietet das Verfahren der analytischen Zentrifugation die Möglichkeit, schwarze Blackboxsysteme mit hoher Präzision zu charakterisieren und so Zugang zur „Mikrostruktur der dispersen Phase“ zu erhalten⁶. Im Kern besteht die Methode darin, während eines Zentrifugenlaufs mittels optischer Verfahren *in line*, das heißt, während der Messung, in die Messzelle hineinzusehen und die Aufklärung *in situ* zu beobachten. Dabei ist auch klar, dass die Sedimentationsgeschwindigkeit der Teilchen ohne das Auftreten von Zonensedimentation und unter der Annahme, dass es nicht zur Ausbildung von Instabilitäten während der Messung kommt⁷, von der Teilchengröße und -form, der Viskosität der kontinuierlichen Phase und der Dichtedifferenz zwischen Feststoff und Flüssigkeit abhängt. Einen Abriss über das Funktionsprinzip und die ermittelten Messwerte liefert Abbildung (5). Zunächst wird eine Tinte, die im Fall von Brennstoffzelektroden üblicherweise aus Platinpartikeln auf einem Kohlenstoffgerüst, Ionomer und einem Lösemittel(gemisch) besteht (Abb. 5a) in die Messzelle gefüllt, in den Rotor gelegt

(Abb. 5b) und gemessen (Abb. 5c). Als Signal erhält man zunächst sogenannte *Fingerprints*, bei denen die gemessene Transmission entlang der Position in der Messzelle aufgetragen wird und ein Farbcode (hier von dunkel nach hell) die Zeitinformation codiert. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird oft nur ein Teil der Messungen visualisiert.

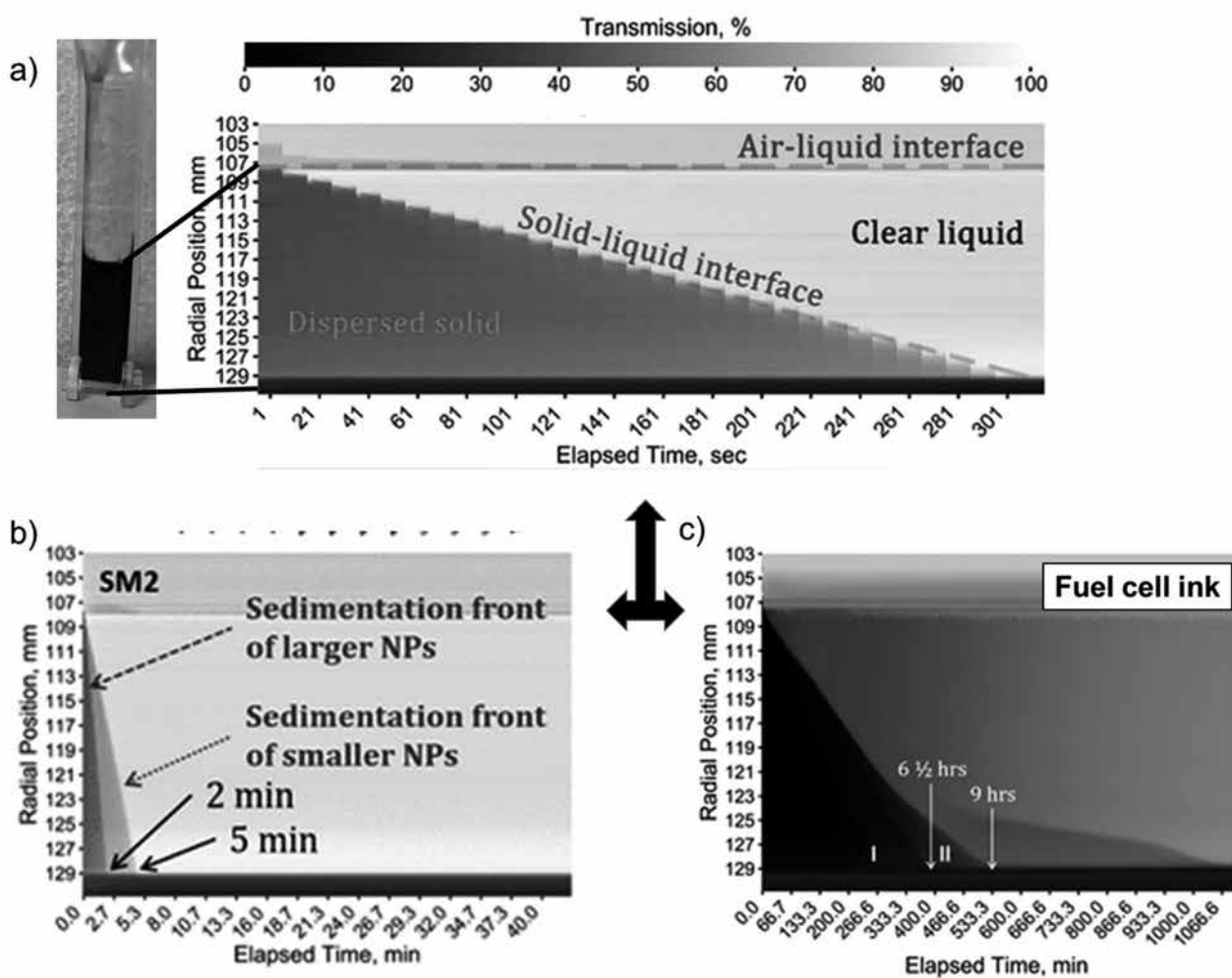
Obwohl derartige Messungen ganz offensichtlich Zugang zu komplexen Systemen liefern, bleibt die Frage der Schnittstellengestaltung und damit nach der Darstellung: Fingerprints sind für Nicht-Expert*innen ohne Training und Erfahrung schwer zu interpretieren und insbesondere für digitale „Endkunden“, das heißt als Interface zur automatisierten Probenauswertung (Abb. 4, Ad 2), nicht geeignet. Daher entwickelte Shalmali Bapat, die seit 2019 in meiner Arbeitsgruppe promoviert, im Rahmen ihrer Doktorarbeit sogenannte Transmittogramme. Einen Überblick gibt Abbildung (6). Ohne Eingriff auf die Daten zu nehmen, sondern einzig durch die Zuordnung entsprechender Graustufenwerte und Umorganisation der Auftragung liefert ein Transmittogramm wesent-

lich mehr Informationen sowohl für den menschlichen Betrachter als auch eine potentielle maschinelle Schnittstelle. Wie aus Abbildung (6a) hervorgeht, ist der entscheidende Vorteil die Auftragung der Zeit auf der x-Achse, die Einblick in die Sedimentationsdynamik liefert. Des Weiteren lassen sich auf einen Blick alle relevanten Grenzflächen identifizieren: Der Meniskus, das heißt die Grenzfläche Flüssig-Luft der den Füllstand der Messzelle anzeigt (rot), sowie die in diesem Fall linear verlaufende Sedimentationsfront (rosa) zwischen der die Teilchen enthaltenen Dispersion (grün) und der Klarphase (blau).

Des Weiteren zeigt Abbildung (6b) das Ergebnis einer Messung

von sphärischen SiO₂ Partikeln. Bei der aus zwei unterschiedlichen Größenfraktionen bestehenden Probe sind die Sedimentationsfronten der kleinen und großen Teilchen klar zu erkennen. Im Gegensatz dazu zeigt Abbildung (6c) die Messung einer mittels Ultraschallsonotrode dispergierten und in Kooperation mit dem Zentrum für Brennstoffzellen-Technik GmbH (ZBT) hergestellten Tinte für eine Brennstoffzellelektrode (Kathoden-Katalysator-Schicht, KKS). Aufgrund der ausgeprägten Absorption der Probe (lichtschluckendes Schwarz aufgrund des in der Probe enthaltenen Kohlenstoffs) sind die Übergänge zwar weniger deutlich zu erkennen, es lassen sich aber klar zwei Sedi-

mentationsfronten I und II identifizieren. Ebenso kommt es nach etwa neun Stunden zur Rückdiffusion, die sich in einem dunkleren Bereich bei längeren Sedimentationszeiten äußert. Diese Darstellung wird in aktuellen Studien systematisch untersucht und um zusätzliche Methoden erweitert⁸, wobei alle das Ziel verfolgen, die Struktureigenschaften von Tinten und Pasten intuitiv auszulesen. Zusammen mit Partnern wird dadurch erstmals eine Verknüpfung von Material-, Prozess- und Performanceeigenschaften auf Bauteilebene erreicht, die es erlaubt Anforderungen zu identifizieren und Formulierungen abseits von Empirie, das heißt wissenschaftlich, einzustellen.



(6) a) Transmittogramm; b) kugelförmige, monidisperse SiO₂ Partikel in Wasser als Modellsystem mit linearer Sedimentationsfront; c) reale Brennstoffzelltinte mit zwei nichtlinearen Sedimentationsfronten I und II und Rückdiffusion (~9 Stunden).

Quelle: Nach Shalmat und Segets, ACS ANM 2020 (Bapat & Segets, 2020), Copyright American Chemical Society.

4. Wie geht es weiter?

Dieser Überblick kann nur einen kurzen Abriss geben, wie bessere und in größerer Menge vorliegende Daten, kombiniert mit deren Analyse, die sich von statistischen Methoden bis zu maschinellem Lernen erstreckt, helfen, Prozesse für neue Materialien zu entwickeln. Neue Materialien sind im Kontext der Energiewende unverzichtbar und teils sogar zum jetzigen Zeitpunkt in größeren Mengen vorhanden, scheitern allerdings oftmals an der Verarbeitung. Neben der im hier angeführten Beispiel gezeigten Formulierung gibt es allerdings eine Vielzahl an weiteren „Knackpunkten“. Diese erstrecken sich von der Strukturierung der verwendeten partikulären Bausteine, zum Beispiel durch gezielte Herstellung von Überstrukturen mittels Sprühtrocknung, der eigentlichen Beschichtung, das heißt dem gleichzeitigen, kontinuierlichen Auftrag mehrerer Schichten und deren Strukturierung für einen idealen Wärme- und Stofftransport, der Trocknung, bis zum sogenannten Post-Processing, das beispielsweise durch thermische und/oder mechanische Nachbehandlung erfolgt. All diese Schritte werden in der Praxis weitestgehend empirisch entwickelt, was mit einem großen Anteil an „Ausprobieren“ und „Bauchgefühl/Erfahrung“ einhergeht. Für erstes bleibt im Kontext der dringend benötigten Energiewende allerdings keine Zeit und letzteres liegt für neue Materialien mit unbekanntem Eigenschaften, die teils völlig neue Verfahren und Technologien erfordern, oftmals nicht vor. Andererseits bietet die Kombination hochperformanter Materialien mit präziserer Messtechnik, der fortschreitenden Prozessautomatisierung und neuen Auswertefahren, die große Chance, genau dieses Feld neu aufzurollen und anders anzugehen. Nicht zuletzt durch den wachsenden gesellschaftlichen Druck, der letztendlich aus dem sich auch in Europa immer deutlicher abzeichnenden Klima-

wandel resultiert, wird es nicht zuletzt in der Prozessentwicklung erforderlich sein, evolutionären Fortschritt durch einen mit Innovation einhergehenden Paradigmenwechsel zu ersetzen.

Summary

This overview provides a brief insight into how better and more abundant data, combined with its analysis, ranging from statistical methods to machine learning, helps to develop new processes for new materials. New materials are indispensable in the context of the energy system transformation and are sometimes already available in large quantities, but often fail to be processed. In this article, the background will be explained, the problems to face will be described and possible solutions will be shown.

Anmerkungen

- 1) Brown, 1905
- 2) Mahmoud & Segets, 2019; Salaheldin et al., 2017
- 3) Reinhardt, Salaheldin, Distaso, Segets, & Peukert, 2020
- 4) Peukert, Segets, Pflug, & Leugering, 2015; Rumpf, 1967
- 5) Bapat & Segets, 2020
- 6) Detloff, Sobisch, & Lerche, 2006; Lerche & Sobisch, 2014
- 7) Mueth, Crocker, Esipov, & Grier, 1996
- 8) Bapat et al., 2020

Literatur

- Bapat, S., Giehl, C., Kohsakowski, S., Peincke, V., Schäffler, M., & Segets, D. (2020). On the state and stability of fuel cell inks. ChemRxiv.13125401, <https://doi.org/10.26434/chemrxiv.13125401.v1> (preprint).
- Bapat, S., & Segets, D. (2020). Sedimentation dynamics of colloidal formulations through direct visualization: Implications for fuel cell catalyst inks. ACS Appl. Nano Mater., 3, 7384–7391.
- Brown, R. (1905). A brief account of microscopical observations made in the months of June, July and August, 1827, on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in

- organic and inorganic bodies. Philosophical Magazine, 4, 161–173.
- Detloff, T., Sobisch, T., & Lerche, D. (2006). Particle size distribution by space or time dependent extinction profiles obtained by analytical centrifugation. Part. Part. Syst. Charact., 23, 184–187.
- Lerche, D., & Sobisch, T. (2014). Evaluation of particle interactions by in situ visualization of separation behaviour Coll. Surf. A: Physicochem. Aspects, 440, 122–130.
- Mahmoud, A. S., & Segets, D. (2019). Cleaning matters! ACS Comb. Sci., 21, 722–725.
- Mueth, D. M., Crocker, J. C., Esipov, S. E., & Grier, D. G. (1996). Origin of stratification in creaming emulsions. Phys. Rev. Lett., 77, 578–581.
- Peukert, W., Segets, D., Pflug, L., & Leugering, G. (2015). Unified design strategies for particulate products. Adv. Chem. Eng., 46, 1–81.
- Reinhardt, E., Salaheldin, A. M., Distaso, M., Segets, D., & Peukert, W. (2020). Rapid characterization and parameter space exploration of perovskites using an automated routine. ACS Comb. Sci., 22, 6–17.
- Rumpf, H. (1967). Über die Eigenschaften von Nutzstäuben. Staub-Reinhalt. der Luft, 27, 3–13.
- Salaheldin, A. M., Walter, J., Herre, P., Kolle, J. M., Levchuk, I., Brabec, C. J., Segets, D. (2017). Automated synthesis of quantum dot nanocrystals by hot injection: mixing induced self-focusing. Chem. Eng. J., 320, 232–243.

Die Autorin

Doris Segets studierte von 2002 bis 2008 Chemie- und Bioingenieurwesen an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU). Während ihrer Promotionsphase folgte unter anderem ein Auslandsaufenthalt am Lawrence Berkeley National Laboratory in Kalifornien. Nach Abschluss der Promotion 2013 war sie fünf Jahre wissenschaftliche Mitarbeiterin und Leiterin der „Nanoparticle Processing Group“ am Lehrstuhl für Feststoff- und Grenzflächenverfahrenstechnik der FAU und Geschäftsführerin des Interdisziplinären Zentrums für Funktionale Partikelsysteme. Im Jahr 2018 wurde Doris Segets als eine der ersten Professorinnen im Rahmen des Bund-Länder-Programms zur Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses (WISNA) für das Gebiet der Verfahrenstechnik elektrochemischer Funktionsmaterialien an die Universität Duisburg-Essen (UDE) berufen und ist seitdem Mitglied des Center for Nanointegration Duisburg-Essen (CENIDE). Im Juli 2020 erhielt sie die Venia Legendi für „Mechanische Verfahrenstechnik“. Darüber hinaus ist Doris Segets seit 2019 ehrenamtlich als Vorsitzende der ProcessNet-Fachgruppe für Grenzflächenbestimmte Systeme und Prozesse aktiv. Sie ist Trägerin zahlreicher Auszeichnungen, darunter der Friedrich-Löffler-Preis für Nachwuchswissenschaftler vergeben durch die Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen des Vereins Deutscher Ingenieure e.V. (VDI-GVC), als einem der wichtigsten Nachwuchspreise im Bereich der

Partikeltechnologie und des Produktdesigns.
Doris Segets engagiert sich für die Förderung von Nachwuchswissenschaftler*innen und die Gleichstellung und ist seit Juli 2020 Mitglied der Jungen Akademie an der Berlin-Brandenburgischen Akademie der Wissenschaften und der Nationalen Akademie der Wissenschaften Leopoldina.