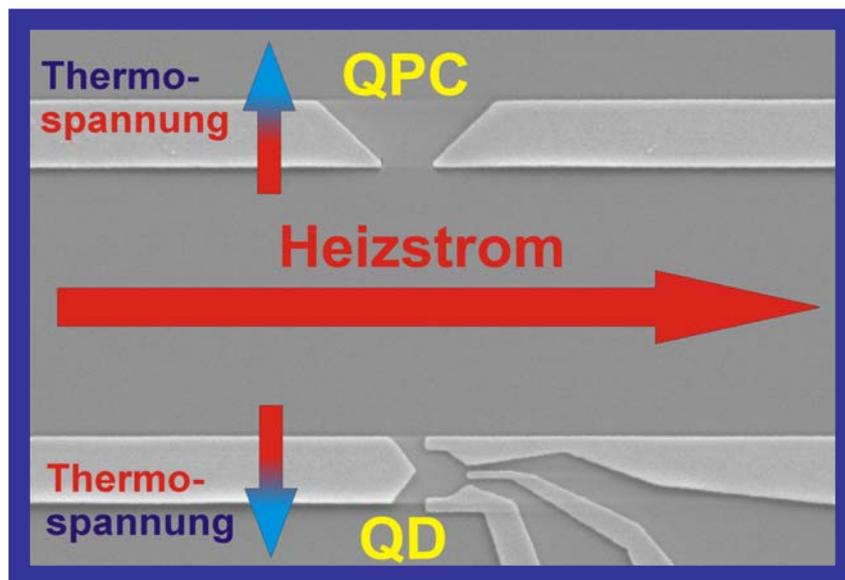


# Antrag auf Einrichtung eines Schwerpunktprogramms der Deutschen Forschungsgemeinschaft

## Nanostrukturierte Thermoelektrika: Theorie, Modellsysteme und kontrollierte Synthese



### **Koordinator:**

K. Nielsch, Universität Hamburg

### **Programmausschuss:**

H. Böttner, Fraunhofer Institut für Physikalische Messtechnik Freiburg

H. Buhmann, Universität Würzburg

O. Eibl, Universität Tübingen

S.F. Fischer, Ruhr-Universität Bochum

R. Hermann, Forschungszentrum Jülich

J. Janek, Universität Giessen

I. Mertig, Universität Halle-Wittenberg

E. Müller, DLR Köln

S. Schlecht, Freie Universität Berlin

R. Schmechel, Universität Duisburg/Essen

O. G. Schmidt, IFW Dresden

P. Woias, Universität Freiburg

P. Ziemann, Universität Ulm

**November 2007**

## Zusammenfassung

Als aussichtsreichster Ansatz zur Entwicklung thermoelektrischer Materialien hoher Effizienz  $Z \cdot T$  gilt heute die Nanostrukturierung. Die gezielte Strukturierung auf der nm-Skala erlaubt die in homogenen „Volumenmaterialien“ direkt miteinander verknüpften drei Transportgrößen von  $Z$  ( $Z = S^2 \cdot \sigma / \lambda$ : Seebeck-Koeffizient  $S$ , elektrische und thermische Leitfähigkeit  $\sigma$  und  $\lambda$ ) teilweise unabhängig voneinander zu verändern. Für nanotechnologische Materialien wurden bereits Werte von  $Z \cdot T > 3$  berichtet, was die Anwendungsmöglichkeiten gegenüber kommerziellen Materialien mit  $ZT \approx 1$  deutlich erweitern würde – es gibt aber bisher widersprüchliche Befunde zur Reproduzierbarkeit der Ergebnisse im Bereich  $Z \cdot T > 2$ .

Bevor das offensichtliche Potential nanoskaliger Thermoelektrika nutzbar gemacht werden kann, wird dieses SPP versuchen, die folgenden Kernfragen zu beantworten:

- (1) Kann die thermoelektrische Effizienz für nanostrukturierte Modellsysteme theoretisch mit hinreichender Genauigkeit berechnet werden, um Wege für den Materialentwickler aufzuzeigen?
- (2) Welche realen Systeme können als geeignete Modellsysteme herangezogen werden, um durch kontrolliertes „Engineering“ (chemische und physikalische Methoden) die Verbindung mit der Theorie zu erreichen? Wie können modellhafte „vertikal“ und „lateral“ nanostrukturierte thermoelektrische Systeme möglichst einfach konstruiert und strukturell charakterisiert werden?
- (3) Wie muss die Messtechnik für die Modellsysteme beschaffen sein, um verlässliche und weltweit akzeptierte Referenzdaten zu erzeugen? Welche experimentellen Methoden können dem Verständnis des thermoelektrischen Transports in Nanostrukturen dienen?

Dieses Schwerpunktprogramm soll wesentliche Beiträge liefern, um diese Erkenntnislücke international zu schließen. Gefördert werden sollen daher:

Die **Entwicklung von definierten experimentellen Modellsystemen** zur unabhängigen Manipulation der thermoelektrischen Kerngrößen mit (elektro-)chemischen oder physikalischen Verfahren, welche entweder die physikalischen Prinzipien der Phononenbarrieren oder des Bandstruktur-Engineering ausnutzen. Die Modellsysteme müssen sich durch gut charakterisierbare Nanostrukturen auszeichnen, z. B. in Form von epitaktischen Multischichtsystemen, Nanostäben, Quantenstrukturen oder monodispersen Nanopartikeln.

Die **strukturelle und thermoelektrische Charakterisierung** zum besseren Verständnis der Transportvorgänge auf der nm-Skala. Projektgegenstand müssen entweder die Messtechnik selbst, deren Abläufe und die messtechnische Präparation sein.

Die **Entwicklung festkörpertheoretischer Modelle**, die das Verständnis für die Transportprozesse in den Modellsystemen erweitern. Projektgegenstand können beispielsweise Finite-Elemente-Modellierungen, ab-initio-Rechnungen auf der Grundlage der Dichtefunktionaltheorie oder analytische Methoden sein, um das rationale Materialdesign zu erleichtern, wobei eine besondere Herausforderung darin besteht, eine Multi-Skalen-Behandlung zu entwickeln.

Durch die Fokussierung auf nanostrukturierte Materialien und deren thermoelektrische Effekte und Phänomene soll eine Abgrenzung erreicht werden zu den umfangreichen Arbeiten an massiven (homogenen) Thermoelektrika und rein anwendungsorientierten Fragestellungen der Modulentwicklung. Die beschriebenen Ziele können nur erreicht werden in der Zusammenarbeit von Experten der Festkörperphysik, der Materialwissenschaften, der Festkörperchemie und der Ingenieurwissenschaften, die ihre speziellen Expertisen in der Theorie, der Nanostrukturierung, der Optimierung von Thermoelektrika und der Messtechnik kombinieren. In den jeweiligen Projektvorschlägen soll sich dies in Form von Verbänden mit möglichst komplementärer Arbeitsweise widerspiegeln. Einzelaktivitäten, welche sich über nur einen Kompetenzbereich erstrecken, sollen damit primär gefördert werden.

Das Schwerpunktprogramm soll über zwei dreijährige Perioden gefördert werden. Es wird vom Koordinator geleitet, dem ein dreiköpfiges Steuerungskomitee zur Seite steht.

# 1. Wissenschaftliches Programm

## 1.1 Problemstellung

Die Welt muss neue Energiequellen erschließen, vorhandene Energie effizienter nutzen und Energie sparen. Dies ist durch den jüngsten UN-Klimabericht verstärkt ins öffentliche Bewusstsein gelangt. Deutschland hat in den Technologiebereichen Wind- und Solarenergie, Wasserkraft und Biomasse eine internationale Führungsrolle übernommen, hinkt aber beim Primärenergieverbrauch mit einem Anteil von nur sechs Prozent an erneuerbaren Energien hinter Ländern wie Schweden oder Österreich her, die auf Quoten bis zu 20 Prozent verweisen können. Neben der Erschließung neuer Energiequellen wird der effiziente Umgang mit Energie in Zukunft an Bedeutung gewinnen und ein Qualitätszeichen fortschrittlicher Volkswirtschaften sein. Mehr als 60 Prozent der insgesamt verbrauchten fossilen Primärenergie werden einer Studie des Lawrence Livermore National Laboratory zufolge ungenutzt als Wärme abgegeben. Zu den größten Abwärmeproduzenten gehören Kraftwerke, Feuerungsanlagen und Kraftfahrzeuge. Technologien, die es ermöglichen, Abwärme hieraus zumindest teilweise zu verwerten, würden wertvolle Effizienzsteigerungen erzielen. Hier könnte die Thermoelektrik durch die direkte Umwandlung von Wärme in Strom wesentliche Beiträge zum effizienteren Energieumgang und damit zum Umweltschutz leisten.

Dass die thermoelektrische Energiewandlung sich heute noch nicht durchgesetzt hat, liegt an der zu geringen Effizienz der bekannten thermoelektrischen Materialien. Die thermoelektrische Effizienz wird meist durch die so genannte Gütezahl  $Z \cdot T = (S^2 \sigma / \lambda) T$  dargestellt ( $S$  = Seebeck-Koeffizient [ $\mu V/K$ ],  $\sigma$  = elektrische Leitfähigkeit [ $1/\Omega cm$ ],  $\lambda$  = thermische Leitfähigkeit [ $W/mK$ ]). Für bereits heute industriell einsetzbare thermoelektrische Materialien stagniert die Gütezahl seit ca. fünf Jahrzehnten bei  $Z \cdot T \approx 1$ , was bei einer Temperaturdifferenz von  $\Delta T = 500 K$  zu einem Materialwirkungsgrad von ca. 10% führen würde. Derartige Materialwirkungsgrade bewirken Systemwirkungsgrade von ca. 5%, die für die Nutzung von Abwärme bisher als unwirtschaftlich gelten. Eine Verdoppelung der derzeit industriell herstellbaren Materialqualität ( $Z \cdot T$ ) könnte laut einer US-amerikanischen Studie den Einsatz von Thermoelektrika insgesamt um das Zehnfache steigern [1].

## 1.2 Stand der weltweiten Forschung

**Thermoelektrische Konverter sind Multitalente:** Sie kühlen oder nutzen Abwärme zur Erzeugung von Strom und funktionieren dabei geräuschlos und wartungsfrei – und das über lange Zeiträume hinweg. Damit kann die thermoelektrische Energieerzeugung zu den erneuerbaren Energien und passender noch zu dem Bereich Energierecycling gerechnet werden. Die Thermoelektrik benötigt ausschließlich Wärme bzw. ein Temperaturgefälle (z.B. die Körpertemperatur und die Temperatur der Luft) zwischen den zwei Seiten eines thermoelektrischen Bauelements. Durch den auftretenden Wärmetransport zum Ausgleich der Temperaturdifferenz werden Ladungsträger in der elektrisch seriellen n/p-dotierten Halbleiterstruktur transportiert. Die Thermoelektrik kann bekanntlich jegliche Form von Wärme (Abwärme von Fahrzeugen oder Müllverbrennungsanlagen, wie auch die menschliche Körperwärme) als Energiequelle nutzen und wird im Alltag schon seit den 1920er Jahren genutzt, z.B. zur Stromerzeugung mittels Kerosinlampen [2]. Die Thermoelektrik sorgte in den 1960er Jahren für die energetische Versorgung bei der Mondlandung. Im Gegenzug entstand damit ein gewaltiger Entwicklungsschub in der Thermoelektrik. Thermogeneratoren sind auch heute erste Wahl für Missionen am Rande unseres Sonnensystems, da hier die Versorgung mit solarer Energie ausgeschlossen ist. Vor allem für den autarken Betrieb von Kleinstgeräten bietet sich ein zukünftiges Anwendungspotenzial [3]. Bereits heute schon können Temperaturunterschiede von wenigen Grad Uhren betreiben.

**Physikalische Funktionsweise:** Die Prinzipien der Stromerzeugung aus Wärme wurde von Thomas J. Seebeck (1821) und der reziproke Effekt von Jean C. A. Peltier (1834) entdeckt [4-6]. Die thermoelektrischen Effekte wurden zunächst an metallischen Thermopaaren

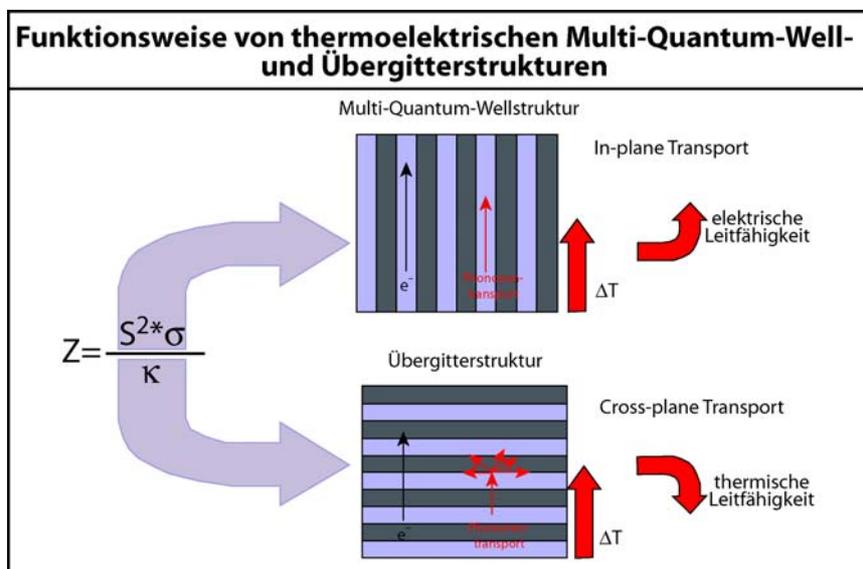


neue Verbindungen untersucht. Hierzu gehören u.a. die Skutterudite (z.B.  $\text{CoSb}_3$ ) [12] und Clathrate (z.B.  $\text{Sr}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$ ) [13], welche man unter dem Begriff „Phonon-Glass Electron-Crystal“ zusammenfassen kann. Ferner werden auch sehr komplexe Chalkogenidstrukturen, welche unter den Abkürzungen LAST (Pb-Sb-Ag-Te-Verbindungen) [14,15] und TAGS (Te-Ag-Ge-Sb-Verbindungen) [16,17] bekannt sind, sowie eine Vielzahl anderer Verbindungstypen (z.B.  $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ ) [18,19] im Rahmen der Thermoelektrika studiert.

**Anwendungsnahe nanotechnologische Materialentwicklung:** In den vergangenen Jahren wurde vielfach empirisch versucht, thermoelektrische Nanokomposite mit einem erhöhten Grenzflächenanteil bzw. geringerer thermischer Leitfähigkeit zu entwickeln. Unter Nanokompositen werden z.B. Werkstoffe verstanden, bei denen sich Nanopartikel oder nanokristalline Ausscheidungen in einer mehr oder weniger geordneten thermoelektrischen Matrix befinden [20,21]. Zurzeit werden vor allem in den USA und China versucht thermoelektrische Nanopartikel, welche im kg-Maßstab generiert werden können, unter hohem Druck und hohen Temperaturen zu Nanokompositen gepresst, die dann in klassischen thermoelektrischen Bauelementen verbaut werden können. Trotz derzeitiger technologischer Schwierigkeiten aufgrund von Rekristallisations-Effekten während der Kompaktierung wird mit einer Effizienzsteigerung um 20-30% bei konventionellen thermoelektrischen Bauelementen gerechnet [20]. Vor wenigen Monaten hat eine chinesische Gruppe  $ZT$ -Werte von  $ZT=1,35$  für aus der Schmelze gesponnene  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ -Multischicht-Nanostrukturen erzielt [22]. Alternativ wird versucht, über chemisch und strukturell selbstorganisierte Systeme zu Übergitterstrukturen mit erhöhtem  $ZT$  zu kommen. Dazu werden im Nanometerbereich Elementschichten in passender Dicke zur Stöchiometrie der  $\text{V}_2\text{VI}_3$ -Verbindungen abwechselnd als periodische Schichtfolge aus Bi-Te-Sb-Te abgeschieden und durch Temperaturerhöhung in die entsprechend alternierenden Schichten  $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Sb}_2\text{Te}_3$  überführt. Die Herstellung strukturell ausgerichteter, selbstorganisierter, thermoelektrisch hochwertiger Schichtfolgen ist H. Böttner et al. in Freiburg bereits gelungen. Mit einem modifizierten System, bei dem jede thermoelektrische Periode der Art  $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Sb}_2\text{Te}_3$  mit einer thermoelektrisch inaktiven Trennschicht abgeschlossen wird, konnten D. C. Johnson und Mitarbeiter (Oregon, USA) Supergitterstrukturen nachweisen [23].

**Effizienzsteigerung mittels nanostrukturierter Modellsysteme:** Im langfristigen Wettlauf um möglichst hohe  $ZT$ -Werte gelten derzeit geordnete Nanomaterialien als besonders viel versprechend. Die Entwicklung von thermoelektrischen Modellsystemen nach wissenschaftlichen Modellkonzepten verspricht wesentlich höhere  $ZT$ -Werte. Diese Strategie soll hauptsächlich in diesem SPP angewendet werden. Darunter versteht man Halbleiter-Heterostrukturen (Quantum-Well bzw. Multischichtstrukturen) (2D) [8], Nanostäbe (1D) und Nanopartikel (0D) sowie auch periodische Quantum-dot-Multischichtstrukturen und Nanokomposite. Thermoelektrische Nanostäbe: Wesentliche theoretische Vorarbeiten zu den Eigenschaften von niederdimensionalen Halbmetallen (z.B. Bi) und Halbleitern (z.B.  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ) wurden von M. Dresselhaus und Mitarbeitern (MIT) [24,25] schon Anfang der 1990er Jahre geleistet. Sie berechneten z.B. die  $ZT$ -Werte für Bi-Nanostäbe [25] bei einer Temperatur von 77 K und sagten voraus, dass  $ZT$  bei Stabdurchmessern von 10 nm und kleiner drastisch ansteigt: von  $ZT < 0,2$  zu  $ZT > 3$ . Um derartige theoretische Voraussagen mit dem Modellsystem „Nanostäbe“ zu verifizieren, haben vor allem Gruppen am MIT und in Berkeley versucht, thermoelektrische Nanostäbe aus Bismut und Bi-Verbindungen (z.B.  $\text{SbBi}$  und  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ) in bienenwabenförmigen  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -Strukturen zu erzeugen [26-30]. Es konnte gezeigt werden, dass Bi-Nanostäbe mit Durchmessern kleiner 50 nm halbleitend sind, während sie bei größeren Durchmessern Halbmetalle sind [31]. An  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ -Nanostäben konnte eine um 90% geringere thermische Leitfähigkeit gegenüber einem unstrukturierten Festkörper nachgewiesen werden [30]. Wenn diese thermoelektrischen Nanostäbe in Matrixmaterialien mit sehr geringer thermischer Leitfähigkeit eingebettet werden können [30], lassen sich daraus effiziente Bauelemente ( $ZT > 1$ ) entwickeln. Im vergangenen Jahr haben A. Stacy und Mitarbeiter aus Berkeley für ein  $\text{Sb}_{0,3}\text{Bi}_{0,7}$ -Nanostab-Ensemble eine Effizienz  $ZT=0,12$  bei 300 K ermittelt [32]. Dieses Ergebnis ist zumindest ein Achtungserfolg, da  $\text{SbBi}$  nicht optimal für Anwendungen bei Raumtemperatur ist. In jüngster Zeit werden theoretische Überlegungen zu komplexeren Modellsystemen angestellt, z.B. über thermoelektrische Multischicht-Nanostäbe [33,34]. Neben größenabhängigen Veränderungen in der

Bandstruktur sollen die zahlreichen Grenzschichten entlang der Stabachse den Transport von Ladungsträgern nicht beeinflussen, aber die Streuung von Phononen erhöhen [33]. **Epitaktische Materialsysteme:** Die höchsten ZT-Werte wurden an epitaktisch gewachsenen Halbleiter-Multischicht- und Quantum-dot-Strukturen nachgewiesen [35-37]. Mit Stapeln aus nur wenigen Nanometer dicken Einzelschichten sind diese geeignet, die Wärmeleitfähigkeit der TE-Materialien im Vergleich zu traditionellen Massivmaterialien deutlich abzusenken – bei gleichzeitig hoher elektrischer Leitfähigkeit. Der Wärmetransport bzw. Ladungstransport kann senkrecht bzw. parallel zu den Filmebenen erfolgen, was zu unterschiedlichen Effizienzsteigerungen führt. Senkrecht zu den Filmebenen (cross-plane) bleibt der Ladungstransport von Löchern oder Elektronen nahezu ungestört, die Phononen werden an den zahlreichen Grenzflächen gestreut, was zu einer deutlichen Reduzierung der thermischen Leitfähigkeit (Phononen-Barrieren) und somit zur Steigerung von ZT führt. R. Venkatasubramanian erreichte 2001 für p-leitende epitaktisch gewachsene Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>(1nm)/Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>(5nm)-Multischichten Effizienzen von ZT=2,4 [35]. T. C. Harman publizierte ein ZT~1,6 für Übergitterstrukturen aus Pb(Se,Te)-Quantenpunkten in einer PbTe-Matrix und ein ZT~2 für n-leitende PbSeTe Übergitterstrukturen [36]. A. Majumdar aus Berkeley und Partner haben jüngst demonstriert, dass geringe Konzentrationen von ErAs-Nanopartikeln in einer epitaktischen In<sub>0,53</sub>Ga<sub>0,47</sub>As-Halbleitermatrix als Streuzentren für Phononen sehr effizient sind und die thermische Leitfähigkeit halbieren können [37].



Beim *In-Plane-Transport* können Quanteneffekte teilweise ausgenutzt werden, da die Ladungsträger sich innerhalb eines Schichttyps mit sub-nm Abmaßen bewegen, was zur Erhöhung der elektrischen Leitfähigkeit führt.

Beim elektrischen Transport über die Grenzflächen hinweg bzw. *Cross-Plane-Transport* wird die thermische Leitfähigkeit durch erhöhte Phononen-Streuung an den Grenzflächen gedrosselt.

Beide Strategien führen zur ZT-Steigerung.

### 1.3 Arbeiten in Deutschland

Der hier vorgeschlagene SPP bildet eine Brücke zwischen verschiedenen Forschungsfeldern der **Energietechnik, der Nanotechnik und der Mikrotechnik**, die in Deutschland, z. T. mit sehr langer Tradition, ausgezeichnet vertreten sind. Es besteht somit eine kritische Masse an ausgezeichneter nationaler Forschung, die im SPP mit innovativer Schwerpunktsetzung auf das Feld der nanostrukturierten Thermoelektrika gebündelt werden soll.

**Nanotechnologie und Nanoelektronik:** Die fortschreitende Miniaturisierung und zunehmende Integrationsdichte elektronischer Bauelemente stellt eine weltweite Herausforderung dar. Eine der großen Aufgaben aktueller Informations- und Kommunikationstechniken ist die gezielte Kontrolle des Wärmetransports, der lokalen Temperaturmessung und die Ausnutzung thermoelektrischer Eigenschaften auf der Nanometerskala. Deutschland bietet für derartige Forschung eine hervorragende Basis bezüglich der experimentellen Expertise und der theoretischen Methodenvielfalt. Die Herstellung und Charakterisierung von Nanostrukturen wird auf internationalem Spitzenniveau betrieben. DFG-geförderte Beispiele sind SFBs (z.B. 418, 445, 486, 491, 508, 513, 569, 631) und Schwerpunktprogramme (z.B. 1165, 1181, 1243), wie auch

Förderverbände des BMBF (z.B. NanoQUIT), die sich verschiedenen Aspekten der Physik/Quantenphysik von Festkörpern auf der Nanoskala widmen. Insbesondere die universitäre Ausstattung im Bereich Halbleitertechnologie und Quantenstrukturen (u.a. in Hamburg, Berlin, Bochum, Würzburg, Regensburg, Stuttgart, Ulm, München) gehört weltweit zum Besten. Eine vergleichbare Forschungsinfrastruktur ist lediglich in Japan und den USA vorhanden. Die Antragsteller repräsentieren diese Vielfalt der Nano-Expertise experimentell und theoretisch.

*In dem beantragten Schwerpunktprogramm soll die vorhandene Expertise in Deutschland in den Bereichen der Nanotechnologie, -strukturierung und -elektronik erstmalig gebündelt werden, um thermoelektrische Eigenschaften auf der Nanoskala umfassend zu untersuchen.*

**Mikrotechnologie und Mikrosystemtechnik:** Nach einer mehr als 40-jährigen Entwicklungsgeschichte präsentiert sich die Mikrosystemtechnik (MST) in Deutschland heute als etablierte Forschungsdisziplin. Ihr technologischer „leverage effect“ führt mittlerweile zu einem steigenden kommerziellen Einsatz von Mikrosystemen in nahezu allen Lebensbereichen. Die deutsche MST-Forschung kann auf eine lange und erfolgreiche Tradition zurückblicken. Die Fülle der MST-relevanten, von DFG (z.B. GR 1037, 1039, 1103, 1240, 1286, 1322, SFB 440, 459, 513, 516) und BMBF (langjähriges Programm „Mikrosystemtechnik“) geförderten Maßnahmen ist hier in Gänze kaum darstellbar. Sie zeugt von einer ausgezeichneten wissenschaftlichen Position, die nach wie vor international kompetitiv ist. Als ausgewiesene universitäre Zentren seien Aachen, Braunschweig, Bremen, Dresden, Freiburg, Hamburg und Ilmenau genannt, daneben eine Vielzahl von Aktivitäten der Fraunhofer-Gesellschaft sowie außeruniversitärer Forschungseinrichtungen.

*Im beantragten SPP sollen Fragen der Systemintegration und der messtechnischen Charakterisierung nanostrukturierter Thermoelektrika mit MST-Konzepten bearbeitet werden. Zudem bietet die Simulation von Materialeigenschaften eine ausgezeichnete Perspektive hinsichtlich einer späteren Anwendung der im SPP erarbeiteten Grundlagen und insgesamt eine ausgezeichnete Brücke zwischen Grundlagen- und Ingenieurwissenschaften.*

**Energietechnik:** Mit der absehbaren Erschöpfung fossiler Energieträger rückt die Bereitstellung und effiziente Nutzung von alternativen Energieressourcen in eine zentrale Position. Die Situation in Deutschland ist erfreulicherweise durch eine entsprechende langjährige Forschungstradition geprägt. Die großtechnische Nutzung regenerativer Energie wurde und wird durch zahlreiche Fördermaßnahmen auf universitärer und industrieller Ebene vorangetrieben. Von DFG (z.B. GR 1322) und BMBF (z.B. Förderschwerpunkt „Energieautarke Mikrosysteme“) wurden jüngst Maßnahmen durchgeführt, die den neuen Bereich der dezentralen Energiewandlung im Sinne eines „Energy Harvesting“ fördern. Strategische Maßnahmen der Großforschungseinrichtungen, z.B. die Initiative „Power to Go“ der FhG zielen in dieselbe Richtung. Aus Sicht der Energieforschung besteht eine ausgezeichnete wissenschaftliche und technologische Basis für diesen SPP. Eine Stellungnahme des Wissenschaftsrates zur Energieforschung in Deutschland [38] nennt bereits 1999 als relevante Universitätsstandorte Aachen, Bochum, Braunschweig, Clausthal, Dresden, Freiburg, Hamburg-Harburg, Hannover, Hohenheim, Karlsruhe, Magdeburg, München und Stuttgart. Dazu kommen mittlerweile weitere Universitäts- und Forschungseinrichtungen des Bundes, der Länder, der FhG und der Helmholtz-Gesellschaft, beispielsweise in Berlin, Freiburg, Jülich, Karlsruhe, Kassel, Stuttgart und Würzburg.

*Im beantragten Schwerpunktprogramm bildet die in Deutschland vorhandene Expertise im Bereich Energietechnik einen Migrationspfad hin zur späteren Anwendung der im SPP erarbeiteten Forschungsergebnisse. Aufgrund der technologischen Nähe von nanostrukturierter Thermoelektrik, Mikrosystemtechnik und Nanotechnik ist diese zunächst in der Mikroenergietechnik zu erwarten, jedoch durchaus nicht auf diesen Bereich beschränkt.*

Die **thermoelektrische Energiegewinnung** lässt sich hinsichtlich des energiepolitischen Ansatzes den regenerativen Energien zuordnen. Wissenschaftlich spannt das Gebiet einen Rahmen um Halbleiterphysik, Materialforschung, Chemie und Ingenieurwissenschaften. In allen Bereichen steht in Deutschland eine breite und gute Basis zur Verfügung. Nach einer langjährigen thermoelektrischen Tradition (Halle/Saale, Karlsruhe, Konstanz) bis Anfang der

1990er folgen aktuell Gruppen mit nennenswerten Ressourcen und tragfähigen Kooperationsbeziehungen (Fraunhofer IPM Freiburg [38,39], BASF Ludwigshafen, DLR Köln, Micropelt Freiburg) und in jüngster Zeit eine signifikant wachsende Anzahl von Aktivitäten in Universitäten, Instituten und bei der Industrie. Zeichen an den Universitäten sind z.B. am IMTEK (Uni Freiburg) das Graduiertenkolleg GR 1322 „Micro Energy Harvesting“ unter Einschluss der Thermoelektrik und Neuberufungen aus jüngster Vergangenheit mit modernen Aspekten der Thermoelektrik (Nielsch, Uni Hamburg, Schlecht, FU Berlin). Am MPI für Mikrostrukturphysik (Halle) laufen Aktivitäten zu thermoelektrischen Nanodrähten, thermoelektrische Nanopartikel sind Forschungsgegenstand an der FU Berlin. Ein erster wichtiger Schritt zur Vernetzung der Thermoelektrik-Forschung und zur Einbindung weiterer Partner wurde im Herbst 2005 mit der Gründung der Deutschen Thermoelektrik-Gesellschaft sowie mit Herbst- und Frühjahrsschulen für Thermoelektrik (Sept. 2006 in Tübingen, April 2008 in Freiburg) getan. Deutschland ist bei internationalen Thermoelektrik-Konferenzen (z.B. European Thermoelectric Conference, 2001 in Freiburg, oder International Thermoelectric Conference, 2009 in Freiburg) regelmäßig - auch mit eingeladenen Vorträgen - vertreten.

*Zusammenfassend ist festzustellen, dass die derzeitige Forschungssituation in Deutschland eine ausgezeichnete Ausgangsposition für die Einrichtung eines SPP zum Thema „nanostrukturierte Thermoelektrika“ bietet. Es werden mit diesem SPP Antragsteller aus Nanotechnik und Materialwissenschaften, Mikrotechnik und Energietechnik in einem langjährigen Kooperationsnetzwerk zusammengeführt. Die Bearbeitung dieses hochinnovativen Themas wäre in anderer, weniger interdisziplinärer Konstellation kaum denkbar. In den genannten Fächern bestehen ausgezeichnete Vorarbeiten, beruhend auf einer z.T. sehr langen Forschungstradition, die im SPP eine ausgesprochen positive Wirkung zeigen werden. Die Umsetzung der hier geplanten Grundlagenforschung in praktische Anwendungen wird durch die interdisziplinäre Zusammenarbeit von Grundlagen- und angewandter Forschung in jedem Fall gefördert.*

#### **1.4 Wissenschaftliche Ziele**

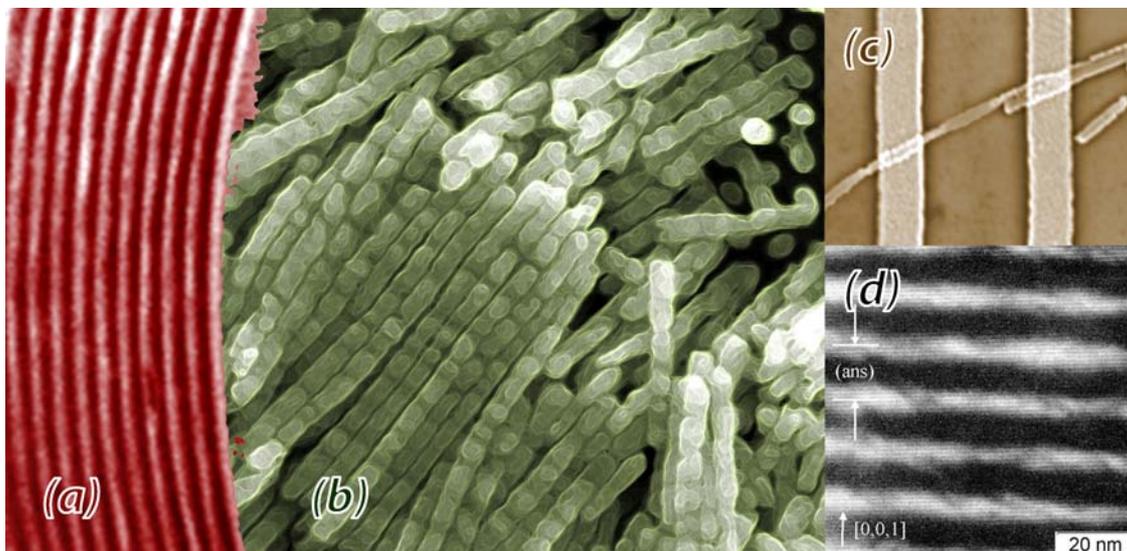
Die technische Zielsetzung für den Bereich Thermoelektrik orientiert sich notwendigerweise an der Verbesserung der thermoelektrischen Qualitätszahl. Im hier vorgeschlagenen Schwerpunktprogramm wird bewusst keine Zielzahl für  $Z \cdot T$  vorgegeben. Vielmehr ist es das übergreifende Ziel, anhand eines verbesserten grundlegenden Verständnisses der drei entscheidenden Transportkoeffizienten (Seebeck-Koeffizient, elektrische Leitfähigkeit, thermische Leitfähigkeit) für die gewählten Modellsysteme – und deren gegenseitiger Abhängigkeit – die Wege zu einer Effizienzsteigerung in nanoskaligen Systemen besser zu kontrollieren. Damit hat das Schwerpunktprogramm das mittelfristige Ziel, realistische Chancen zu eröffnen, routinemäßig präparierbare und technisch nutzbare Materialien mit Werten von  $Z \cdot T \geq 1,5$  in Bauelementen zu erreichen. Hierzu sind in Anlehnung an die drei erläuterten Problembereiche die folgenden Teilziele zu erreichen:

**1)** Für ausgewählte Modellsysteme ist eine möglichst weitgehende theoretische Beschreibung zu erreichen. Angesichts des skalenüberschreitenden Charakters der zugrunde liegenden Phänomene kann dies nicht mit einem einzigen Modellansatz gelingen. Die 1. Förderperiode von 3 Jahren soll zeigen, welche experimentellen Modellsysteme besonders gut geeignet sind für eine theoretische Beschreibung. Für diese Systeme sollte bis zum Abschluss des Programms möglichst eine theoretische Beschreibung entwickelt werden, die von den mikroskopischen Mechanismen hin zu den lokal gemittelten phänomenologischen Transportkoeffizienten führt.

**2)** Mehrere experimentelle Modellsysteme sollen entwickelt werden, die es erlauben, die Korrelation zwischen Materialeigenschaften, Mikrostruktur und Gütezahl möglichst generell zu formulieren. Für die Synthese der Nanostrukturen sind chemische und/oder physikalische Methoden einzusetzen, die ein weitgehend kontrolliertes „Engineering“ von stofflicher Zusammensetzung und Nanostruktur erreichen. Wahlweise können unabhängige (phonon blocking/electron transmitting) oder kombinierte (phonon blocking/electron filtering)

Strategien zur Manipulation der thermoelektrischen Kerngrößen verfolgt werden. Im SPP sollen verschiedene „vertikal“ und „lateral“ nanostrukturierte thermoelektrische Systeme (z.B. epitaktische Multischichtsysteme, Halbleiterlamellen, Nanostäbe, Quantenstrukturen, monodisperse Nanopartikel) entwickelt werden. Die Charakterisierung der Systeme bezüglich lokaler Zusammensetzung, Struktur und Defektstruktur mit geeigneten physikalisch-chemischen Verfahren gehört mit zu den Zielen. Die Stabilität der nanostrukturierten Modellsysteme bezüglich Thermodiffusion sollte als wesentliche Voraussetzung für eine Nutzung innerhalb der Laufzeit des Programms bewertet werden.

3) International richtungweisende und zuverlässige Messverfahren für nanoskalige Thermoelektrika, angepasst an Modellsysteme, sollen als wichtigstes messtechnisches wissenschaftliches Ziel entwickelt werden. Für thermoelektrische Messungen an Nanostrukturen sollen Methoden der mikrotechnischen Präparation entwickelt werden. Insbesondere für Multischichtsysteme bei Messungen senkrecht zur Schichtebene („cross-plane“) trifft dies zu (vertikale Messtechnik). Lateral nanoskalig auflösende Messtechniken sollen bis zur Ortsauflösung im nm-Bereich entwickelt werden. Die Interaktion mit dem Messsystem bei dünnen Schichten und diskreten Nanoobjekten soll im Rahmen des SPP durch mikrotechnische Messplattformen überwunden werden. Im Verlauf des SPP könnte eine langfristige Testplattform etabliert werden, die von möglichst vielen Teilnehmern genutzt werden sollte.



**Beispiele für SPP-relevante Nanostrukturen**, welche beim 1. Rundgespräch am 6./7. September in Fulda präsentiert wurden: (a) Aufgerollte Si/Ge-Übergitterstruktur mit einer gesamten Lagendicke von 145 nm (IFW Dresden); (b) Segmentierte  $\text{Bi}_2\text{Sb}_3/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ -Drähte mit 50 nm Durchmesser (Uni Hamburg/MPI-Halle); (c) Lithographisch kontaktierte  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ -Drähte mit 100 nm Durchmesser (Uni Bochum); (d)  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ -Nanolaminat (Uni Tübingen).

## 1.5 Arbeitsprogramm und thematische Abgrenzung

Das SPP-Arbeitsprogramm ist in drei Kompetenzbereiche (KB) gegliedert:

**KB1: Nanoskalige Thermoelektrika mit definierter Geometrie und Komposition**

**KB2: Strukturelle und thermoelektrische Charakterisierung**

**KB3: Modellierung und Theorie**

In dem SPP sollen Verbundprojekte gefördert werden, in denen ein wissenschaftlicher Austausch idealerweise zwischen den drei Kompetenzbereichen in jedem Teilprojekt angestrebt werden sollte. Neuartige nanostrukturierte Modellsysteme sollen z.B. mit chemischen Syntheseverfahren entwickelt werden, die anschließend detailliert auf ihre physikalischen Eigenschaften untersucht und ggf. modelliert werden. Auch können mit Hilfe der Theorie

neue Entwürfe für thermoelektrische Modellsysteme entstehen, welche anschließend experimentell umgesetzt werden. Im Rahmen früherer Förderprogramme haben einige Projektpartner umfassende Expertisen in der Entwicklung von nanostrukturierten Materialien sammeln können, welche innerhalb des SPP mit einem überschaubaren Aufwand auf die Entwicklung von thermoelektrischen Modellsystemen und Materialien übertragen werden können. Ebenso sollen grundlagenorientierte Fragestellungen mit quantenphysikalischem Bezug an ausgewählten Modellsystemen untersucht werden. Um den interdisziplinären Austausch zu fördern, sollen Projekte, welche ausschließlich auf die Materialentwicklung oder deren strukturelle Charakterisierung abzielen, nicht am SPP partizipieren. Ein wesentlicher Schwerpunkt wird die Entwicklung von standardisierten thermoelektrischen Messverfahren einnehmen, in den die Expertisen aus den Bereichen Mikrosystemtechnik, Elektrotechnik und Rastersondenmikroskopie einfließen.

### **KB1: Nanoskalige Thermoelektrika mit definierter Geometrie und Komposition**

Um thermoelektrische Modellsysteme zu entwickeln und herzustellen, sollen chemische als auch physikalische Syntheseverfahren zum Einsatz kommen. Folgende Methoden können u.a. angewendet werden: lösungsschemische Präparation und Gasphasensynthese von Nanopartikeln, elektrochemische Abscheidung aus organischen und ionischen Elektrolyten, Atomic Layer Deposition (engl. kurz ALD), MOCVD (engl. kurz: Metal Organic Chemical Vapour Deposition), MBE (engl. kurz. Molecular Beam Epitaxy), gepulste Laser-Abscheidung (kurz engl. PLD Pulsed Laser Deposition) und klassische Aufdampfverfahren. Vor allem mittels chemischer Syntheseverfahren wurden in jüngster Zeit beachtliche Fortschritte bei der Entwicklung komplexer 2D- und 3D-Nanostrukturen erzielt. Die Antragssteller verfügen über eine sehr breite Expertise bei der Mikro- und Nanostrukturierung mittels lithographischer Verfahren, welche in vielschichtiger Weise mit den oben genannten Herstellungsverfahren verknüpft werden kann.

In der 1. Förderperiode sollen thermoelektrische Effekte auf der nm-Skala an klassischen thermoelektrischen Materialien (V-VI-Verbindungen, IV-VI-Verbindungen und ihre Mischkristalle) und an wohlbekannten Halbleitermaterialien wie SiGe, III-V-Verbindungen, wie z.B. an GaAs/AlGaAs oder auch an ZnO erforscht werden. Eine weitere interessante Materialklasse mit großen thermoelektrischen Effekten sind oxidische Perowskite. In leicht dotierten Manganaten (z. B. Sm und Pr dotiertes  $\text{CaMnO}_3$ ) sowie in Cobaltaten (z. B.  $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$  oder  $\text{NaCo}_2\text{O}_4$ ) werden thermoelektrische Koeffizienten in derselben Größenordnung wie in Bismuttellurid-Verbindungen gefunden. Die aus den Untersuchungen an Modellmaterialien und -systemen erhaltenen Kenntnisse sollen, vor allem im zweiten Abschnitt des SPP, auf weitere aussichtsreiche thermoelektrische Materialklassen übertragen werden, darunter Skutterudite, Zinkantimonid, Mangan- und Magnesiumsilizid, Clathrate, Halb-Heusler-Legierungen, Zintl- und Chevrel-Phasen.

Im SPP sollen sich alle Verbundprojekte mit experimentellen Modellsystemen auseinandersetzen, deren thermoelektrisch relevante physikalische Eigenschaften durch ihre geometrischen und strukturellen Parameter wie die mittlere Partikelgröße oder Schichtdicke manipulierbar sind. Vorangetrieben werden soll die Entwicklung von Nanostrukturen mit anisotropen thermoelektrischen Eigenschaften, z. B. Multischichtsysteme oder 2D-geordnete Nanostab-Ensembles, die in eine thermisch isolierende Matrix eingebettet sind. Zwei wesentliche Optimierungsansätze für Anwendungen sollen im SPP experimentell bearbeitet werden: ZT-Steigerung (1) durch drastische Reduktion der thermischen Leitfähigkeit mittels erhöhter Phononenstreuung innerhalb von Nanostrukturen und (2) durch Quanteneffekte bzw. Veränderung der Bandstruktur und Ladungsträgerkonzentration aufgrund reduzierter Dimensionen. Die hierfür relevanten Klassen von Nanostrukturen verschiedener Dimensionalität werden im Folgenden vorgestellt:

**OD-Strukturen:** Lithographisch definierte Quantenstrukturen: Für die Untersuchung von fundamentalen Transporteigenschaften stellen nanolithographisch definierte Quantenstrukturen und Quantenpunktsysteme hervorragende Modellsysteme dar. Durch die Lokalisierung der Ladungsträger ist das Energiespektrum diskret. Man spricht hier auch von „künstlichen Atomen“ und „Molekülen“, deren Energiespektren über externe Parameter über weite Berei-

che steuerbar sind. Diese Steuerbarkeit ermöglicht die Messung der Transportkoeffizienten, z.B. Seebeck-Koeffizient und thermische Leitfähigkeit. So sind detaillierte Aussagen über (1) die Statistik der Energieniveaueverteilung [41,42], (2) die Art des Energie-Transfers bezogen auf den beteiligten Transportprozess und (iii) die Geometrie bzw. Symmetrie des Systems [43] sowie (3) über die Beiträge des Entropie-Transfers [44] möglich.

**1D-Strukturen:** Thermoelektrische Nanostäbe eignen sich als Modellsysteme, in welchen der (teilweise ballistische) Ladungstransport auf eine Dimension begrenzt ist und die thermische Leitfähigkeit aufgrund der verstärkten Phononenstreuung an den Staboberflächen deutlich reduziert wird. Einige Materialien, z.B. das BiSb-System, weisen dimensionsabhängige Quanteneffekte schon bei Durchmessern von 50 nm auf. Zwei Herstellungsansätze sollen für Nanostäbe genutzt werden: (1) Das in der Halbleiterphysik populäre VLS-Verfahren (engl. kurz: Vapour Liquid Solid Growth) soll zum epitaktischen Wachstum von monodispersen Halbleiter-Nanostäben in dichten Ensembles genutzt werden. Zur Untersuchung können die Nanostäbe in eine thermisch isolierende Matrix eingebettet werden, oder es erfolgt die Charakterisierung am Einzelstab durch lithographische Kontaktierung auf einem Substrat. (2) Mittels Templatsystemen, z.B. durch geordnete Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Porenstrukturen oder spuren-geätzte Polymermembranen, werden thermoelektrische Nanostäbe durch elektrochemische Abscheidung aus wässrigen, organischen oder ionischen Elektrolyten erzeugt. Mittels Atomic Layer Deposition können die Templatstrukturen im Porendurchmesser reduziert oder thermisch optimiert werden. Ferner können thermoelektrische Multischichtnanoröhren mit radialem Schichtaufbau durch ALD in den Poren erzeugt werden. Die thermoelektrische Charakterisierung von Nanostäben und Nanoröhren ist eine besondere Herausforderung und muss mit der Entwicklung neuer Messtechniken im KB2 einhergehen.

**2D-Strukturen:** Polykristalline Mehrschichtstrukturen: Durch Sputtern, Chemical Vapour Deposition (CVD) oder elektrochemische Verfahren können thermoelektrische Multischichtsysteme mit sub-nm Präzision auf großflächigen Substraten hergestellt werden, die mit einem überschaubaren Aufwand in Anwendungen integriert werden können. Mittels Atomic Layer Deposition können auch auf stark texturierten Oberflächen konforme Multischichten erzielt werden. Bei den physikalischen Untersuchungen werden die Bestimmung der thermoelektrischen und elektrischen Leitfähigkeit und des Seebeck-Koeffizienten parallel und senkrecht zur Filmebene integrale Fragestellungen sein. Epitaktische Multischichten und Quantenpunkte: Mittels MBE oder MOCVD lassen sich einkristalline Halbleiter-Multischichtstrukturen von besonderer Qualität erzeugen. In den vergangenen Jahrzehnten wurde in Deutschland die Halbleiterphysik sehr intensiv gefördert, so dass einige Anlagen zum epitaktischen Wachstum von einkristallinen Heterostrukturen und Quantenpunktfilmen mit klassischen Halbleitern dem SPP zur Verfügung stehen. Eine Vielzahl an thermoelektrischen Fragestellungen lässt sich mit diesen Systemen untersuchen, u.a. die Reduktion der thermischen Leitfähigkeit durch Einbringung von Barrierschichten oder Quantenpunkten, welche als Phononenstreuungszentren dienen, oder die thermoelektrischen Eigenschaften von 2D-Elektronengasen. Im SPP besteht Bedarf, Ressourcen für das epitaktische Wachstum von Bismut- oder Blei-basierten Verbindungshalbleitern aufzubauen. Ferner soll der mechanische Stress in Halbleitermultischichtstrukturen genutzt werden, um teilweise aufgerollte Halbleiter-Nanostrukturen oder Heterostrukturlamellen in Form eines nicht vollständig geschlossenen Zylindermantels herzustellen.

**3D-Strukturen:** Nanokomposite und andere 3D-Nanostrukturen: International wird zumeist empirisch an der Entwicklung thermoelektrischer Nanokomposite geforscht. Obwohl die physikalische Betrachtung von Nanokompositen und deren Modellierung nicht trivial ist, sollen ungeordnete und geordnete Nanokomposite aus definierten Nanopartikeln als physikalische Modellsysteme innerhalb des SPP untersucht werden. Ein breites Portfolio an Herstellungsmethoden wird dem SPP für die Synthese von monodispersen Nanopartikeln aus der Flüssig- und Gasphase zur Verfügung stehen. Diese Nanopartikel sollen schonend miteinander oder mit einer chemisch gleichen oder auch verschiedenen mikrokristallinen Matrix verpresst werden, ohne dass dabei ein Wachstum der Nanokristallite auftritt. Aus physikalischer Sicht ist ein hoher Erkenntnisgewinn von Untersuchungen an Kompositstrukturen und hochgeordneten Übergitterstrukturen aus besonders monodispersen Nanopartikeln zu erwar-

ten. Ferner können thermoelektrische 3D-Modellsysteme durch Infiltration von Opalstrukturen aus Silikaten und Polymeren mittels elektrochemischer Abscheidung oder ALD entwickelt werden.

## **KB2: Strukturelle und thermoelektrische Charakterisierung**

Der Erfolg des Schwerpunktprogramms „Nanostrukturierte Thermoelektrika“ hängt wesentlich von der Bereitstellung und Weiterentwicklung von Messmethoden für thermoelektrische Nanostrukturen ab. Diese Methoden müssen eine Charakterisierung der eigentlichen thermoelektrischen Eigenschaften ebenso liefern wie Informationen über weitere physikalische und chemische Eigenschaften der präparierten Strukturen. Weltweit herrscht ein besonderer wissenschaftlicher Entwicklungsbedarf auf diesem Gebiet. Die Verknüpfung langjähriger Erfahrungen in der thermoelektrischen Messtechnik mit modernen Verfahren der Mikrosystemtechnik soll zu einer Miniaturisierung thermoelektrischer Messverfahren führen mit dem Ziel der Anwendung auf mikro- und nanostrukturierte Systeme.

Strukturelle Charakterisierung: Die strukturelle und chemische Charakterisierung ist entscheidend für die Qualitätsbeurteilung der Nanostrukturen sowie zu der Entwicklung als Modellsysteme. Thermoelektrische Materialien weisen zahlreiche strukturelle und chemische Freiheitsgrade auf, die gezielt im Hinblick auf den Wirkungsgrad kontrolliert und optimiert werden müssen. Die zugrunde liegenden physikalischen Gesetzmäßigkeiten erfordern Materialien mit Defektstrukturen auf definierten Längenskalen. Die Raster- und Transmissionselektronenmikroskopie sollen mit Spektroskopie-Verfahren bis hin zu atomarer Ortsauflösung diese Unterstützung bereitstellen.

Neben abbildenden Methoden ist es bei nanostrukturierten Materialien wichtig, integrierende strukturelle Informationen zu einer statistisch signifikanten Anzahl von Nanoobjekten zu gewinnen. Neutronen- und Röntgenstreuungsmethoden bieten sich hierfür besonders an. Methoden wie Kleinwinkelstreuung und Reflektometrie werden angewendet, um die Größenverteilung, die Schichtdicken und die Agglomeration von Partikeln zu bestimmen. Mit diesen Verfahren wird auch an dünnen Schichtproben ein ausreichendes Analysevolumen erreicht. Die lokale atomare Umgebung wird durch eine Paarverteilungsfunktions-Analyse studiert. Resonante Röntgenstreuung und Kleinwinkelstreuung sollen elementspezifische Strukturinformationen liefern. Daneben bietet sich inelastische Streuung an, um die Gitterdynamik zu studieren. Messungen der Phononeneigenschaften liefern einen direkten Einblick in die mikroskopischen Mechanismen der Gitterwärmeleitfähigkeit [45]. Inelastische Röntgen- und Neutronenstreuung sollen eingesetzt werden, um den Einfluss der Nanostrukturierung auf die Phononen zu bestimmen. Dies ist durch inelastische Kernresonanz-Messungen teilweise auch elementspezifisch möglich [46]. Ferner sind auch IR- und Raman-Spektroskopie aussagekräftig.

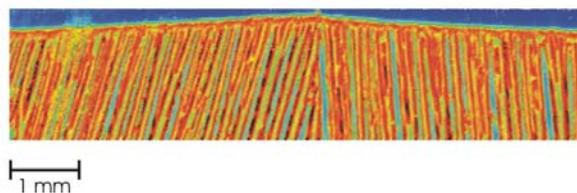
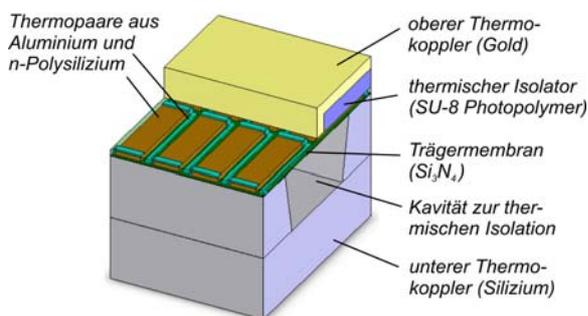
Thermoelektrische Charakterisierung: Derzeit besteht international ein Bedarf an verläSSLicher und standardisierter Messtechnik für die zentralen thermoelektrischen Größen – Seebeck-Koeffizient, elektrische Leitfähigkeit und thermische Leitfähigkeit. Dabei stellt die entsprechende Charakterisierung nanoskaliger Systeme eine besondere Herausforderung dar. Thermoelektrische Messungen an Nanostrukturen bedürfen häufig einer aufwendigen mikrotechnischen Präparation. Insbesondere für Multischichtsysteme bei Messungen senkrecht zur Schichtebene („cross-plane“) trifft dies zu. International richtungweisende und zuverlässige Messverfahren angepasst an die Modellsysteme (KB1) sollen daher in KB2 entwickelt werden.

Eine Herausforderung für die Charakterisierung thermoelektrischer Eigenschaften von Nanoobjekten ist die kontrollierte Erzeugung von Temperaturdifferenzen auf der Nanometerskala. In Bezug auf die Untersuchung künstlicher Atome und Moleküle konnten jedoch eine geeignete Stromheizmethode entwickelt und Thermokraftmessungen an Nanostrukturen durchgeführt werden [47,48]. In diesem SPP soll diese Methode für die Entwicklung nanostrukturierter Thermoelektrika eingesetzt werden. Alternativ zu einer Untersuchung als Einzelobjekte sollen Arrays parallel ausgerichteter Nanostäbe (ggf. geführt im Templat) in cross-plane-Anordnung charakterisiert werden. Zur Charakterisierung der thermischen

Leitfähigkeit dünner Schichten wird vielfach die  $3\omega$ -Methode angewendet, welche das präzise Aufbringen einer Miniatur-Elektrodenstruktur mittels lithografischer Techniken erfordert. Mittels Lock-in-Technik wird anschließend die Wärmeleitfähigkeit der thermoelektrischen Schicht.

Für in-plane-Messungen an nanostrukturierten Schichten sowie die Charakterisierung von 3D-Nanostrukturen und Nanokompositen sind bei Messproben mit Abmessungen im  $\mu\text{m}$ -Bereich herstellbar. Die hier benötigten thermoelektrischen Messverfahren sind grundsätzlich bekannt, es handelt sich jedoch um nichtkommerzielle Methoden, deren Bereitstellung und präzise Beherrschung insbesondere bei höheren Messtemperaturen sowie bei der thermischen Schichtcharakterisierung so aufwendig ist, dass sie nur bei wenigen Gruppen zur Verfügung stehen. Hier kann der SPP von langjährigen Vorarbeiten einiger Institute profitieren. Die Beteiligung ingenieurwissenschaftlicher Disziplinen (Elektrotechnik, physikalische Messtechnik) soll die Bereitstellung und Weiterentwicklung eines umfassenden Methodenspektrums unterstützen. Galvanomagnetische und thermomagnetische Messungen erlauben die Bestimmung der Konzentration und Beweglichkeit der Ladungsträger sowie den Nachweis nanostrukturbedingter Änderungen der Bandstruktur nahe dem Fermi-Niveau.

Nanostrukturierte Thermoelektrika verlangen nach einer nanoskalig auflösenden Messtechnik. Hier stehen einzelne oder mehrere wechselwirkende Quantenpunkte, -drähte oder Lamellen im Zentrum des Interesses, ebenso halbleitende oder metallisch gefüllte Nanoporen sowie das Verhalten einzelner Makromoleküle. Die Basis zur nanoskaligen Messung des Seebeck-Koeffizienten sind dabei Varianten der Rastertunnelmikroskopie (STM). Zielgröße ist stets die lokale Thermospannung. Neue Modulationstechniken erlauben die stromlos potentiometrische Messung, da sie die Störanfälligkeit der üblichen dc-Rückkopplung bei  $I_{dc}=0$  überwinden [49-51]. Damit kann im Tunnelmode eine laterale Auflösung von rund 20 nm und eine hohe Genauigkeit des Potentials erreicht werden. Auf Basis einer ähnlichen Anordnung wurde in jüngster Zeit [52] über eine Seebeck-Messung an molekularen Kontakten berichtet. In Verbindung der  $3\omega$ -Methode mit STM wurde bereits eine ortsauflösende Wärmeleitfähigkeitsmessung im nm-Bereich demonstriert. Ein weiterer Ausgangspunkt für die ortsauflösende Seebeck-Messung ist die unikale Technik der Mikro-Thermosonde. Durch das Aufsetzen einer erwärmten feinen Spitze bildet sich ein fokussierter Temperaturgradient im Material. Die derzeit erreichte Ortsauflösung im  $\mu\text{m}$ -Bereich dient vor allem zur Analyse lokaler funktioneller Inhomogenitäten am makroskopischen Festkörpern und dünnen Schichten. Im transienten Modus und durch feinere Sondenspitzen mittels mikrotechnischer Verfahren soll die Methode bis zur Ortsauflösung im nm-Bereich entwickelt werden. Die Simultanmessung der thermoelektrischen Größen wird ein Sondenverfahren für die lokale Bestimmung der Gütezahl  $ZT$  ermöglichen.



Oben: Mapping des Seebeck-Koeffizienten an einer eutektischen Lamellenstruktur in Bismutellurid (oben: einkristalliner Bereich)

Links: Schematische Darstellung eines mikro-systemtechnischen Thermogenerators [53]

Spezifische Messanordnungen mit Mikro-Teststrukturen zur Charakterisierung der Anisotropieeigenschaften an thermoelektrischen Modellsystemen sollen realisiert werden. Dabei stellt die thermische Ankopplung und die Interaktion mit dem Messsystem bei dünnen Schichten und diskreten Nanoobjekten eine große Herausforderung dar. Spezifische Probleme reichen von der Reproduzierbarkeit des Messaufbaus (z.B. Beherrschung parasitärer Wärmeflüsse), über generelle Fragen zur Integrationsstrategie des thermoelektrischen Materials im Messaufbau

(in-situ-Deposition bzw. Aufwachsen von Nanostrukturen) bis hin zur wechselseitigen Beeinflussung von Testprobe und Messapparatur (parasitäre thermische und elektrische Effekte). Zur Lösung dieser Probleme sollen im Rahmen des SPP mikrotechnische Messplattformen aus mikrostrukturierten Silizium- oder Glassubstraten entwickelt werden [53], die thermische Koppelstrukturen, Mikro-Temperatursensoren, Heizer und Kühlstrukturen sowie elektrische Kontakte tragen. Im Verlauf des SPP könnte eine langfristige Testplattform etabliert werden, die von möglichst vielen Teilnehmern genutzt werden soll.

*Der Neuartigkeit und Komplexität der erforderlichen thermoelektrischen Messtechniken entsprechend nimmt ein Methodenvergleich mittels geeigneter Referenzmaterialien eine besondere Rolle ein. In der Abschlussphase des SPP gewinnt die thermoelektrische Systemcharakterisierung Bedeutung für die Demonstration von neuen Bauelementen basierend auf fortschrittlichen nanostrukturierten Thermoelektrika, insbesondere für den Einsatz im Bereich regenerativer Energiequellen.*

### **KB3: Modellierung und Theorie**

Ein intensiver Austausch zwischen Theorie und Experiment soll insbesondere in gemeinsamen Verbundprojekten intensiviert werden: In KB3 beschäftigen sich Experten mit der theoretischen Modellierung der experimentellen Modellsysteme, welche im KB1 entwickelt und im KB2 analysiert werden. Darüberhinaus sollen in KB3 Arbeiten gefördert werden, die wegweisend für das Grundlagenverständnis thermoelektrischer Eigenschaften von nanoskaligen Materialien sind. Hierbei werden Methoden der theoretischen Physik wie auch der angewandten Ingenieurwissenschaften eingesetzt. Die speziellen Herausforderungen liegen einerseits in der Erarbeitung fundamentaler Grundlagen thermoelektrischer Eigenschaften von Nanostrukturen und andererseits in der Methodenwahl für eine umfassende Multi-Skalen-Behandlung.

Transporteigenschaften nanostrukturierter Materialien: Multischichtstrukturen und Übergitterstrukturen aus z. B. Si/Ge, Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>/Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> [54] weisen erhöhte Umwandlungseffizienzen  $ZT$  auf. Nanokristalline Metalloxidschichten hingegen weisen gegenüber einer einkristallinen Schicht wesentlich reduzierte thermische Leitfähigkeiten auf [55]. Deshalb ist ein Schwerpunkt von KB3, den Einfluss von Grenzflächen und Unordnung auf die thermische und elektrische Leitfähigkeit und den Seebeck-Koeffizienten systematisch zu untersuchen, um damit zur Optimierung des thermoelektrischen Umwandlungsfaktors  $ZT$  beizutragen. Die Lösung quasiklassischer Drift-Diffusionsgleichungen in Kombination mit Bandstrukturrechnungen soll dabei durch die numerische Transfermatrixmethode ergänzt werden [56]. Diese erlaubt die Modellierung der in KB1 entwickelten nanostrukturierten Systeme unter Berücksichtigung von Quantentransporteffekten.

Die Transporteigenschaften nanostrukturierter Materialien können bei hohen Temperaturen mit quasiklassischen Drift-Diffusionsgleichungen und aus der Lösung der Boltzmann-Gleichungen berechnet werden, wobei die Materialparameter aus den ab-initio-Rechnungen oder aus experimentellen Untersuchungen der thermoelektrischen und magnetfeldabhängigen Eigenschaften erhalten werden, um die Modelle zur Bandstruktur und Ladungsträgerstreuung numerisch anzupassen. Dies ist gültig, wenn die Ausdehnung der Nanostruktur groß ist gegenüber der mittleren freien Weglänge, d.h. für verunreinigte Systeme bei endlichen Temperaturen [57,58].

Quantenkohärenter Transport, der insbesondere für Modellsysteme mit atomarer Ausdehnung wie Nanokontakte [59] und Tunnelkontakte [60] von Bedeutung ist, kann mit der Methode der linearen Antwort und mit der numerischen Transfermatrixmethode behandelt werden. Eine große Herausforderung im Rahmen dieses Schwerpunktprogramms wird die Berücksichtigung der phononischen Freiheitsgrade sowohl im quasiklassischen als auch im quantenkohärenten Grenzfall sein. Phononenspektren in Bulkmaterialien können mittels verschiedener Programme im reziproken Raum (durch Störungstheorie) oder im realen Raum (durch endliche Auslenkungen) berechnet werden. Die Kenntnis der Phononen ist notwendig für die Berechnung des Phononenbeitrags zum thermischen Widerstand. In Schichtsystemen wird der phononische Wärmetransport bestimmt, indem die Reflektivität

bzw. ballistische Transmission von Phononen an den Grenzflächen zwischen den Schichten berechnet wird. Im gleichen System wird auch der Seebeck-Koeffizient  $S$  im Rahmen des ballistischen Transports berechnet. Mit diesem Ansatz ist die Optimierung des Wärmetransports in Schichtsystemen möglich.

Materialspezifische Ab-Initio-Rechnungen und Bandstrukturen: Auf der Grundlage der Dichtefunktionaltheorie haben sich *ab-initio*-Rechnungen zu einer leistungsfähigen Methode entwickelt, die ein theoretisches Materialdesign gestattet. Die Methode ist für Materialien im Nanometerbereich besonders geeignet, da physikalische Eigenschaften unter Berücksichtigung von Quanteneffekten untersucht werden. Ausgehend von der atomaren Struktur des Systems unter Berücksichtigung der Randbedingungen der Nanostruktur kann der Bogen von den elektronischen und phononischen Eigenschaften bis hin zu den makroskopischen Eigenschaften gespannt werden. Das wurde insbesondere für die elektrischen und thermoelektrischen Eigenschaften demonstriert [57-60]. Die Grenzen der *ab-initio*-Untersuchungen sind durch die Größe des Systems bestimmt. Der numerische Aufwand der parameterfreien Beschreibung wächst in modernen Verfahren proportional zur Zahl der Atome im System [61,62,63]. Der Einfluss spezifischer Quantenfluktuationen in korrelierten Materialien kann mit der Kombination aus Dichtefunktionaltheorie und Dynamischer Mean-Field-Theorie erfolgreich beschrieben werden. Die Kombination beider Methoden erlaubt die Verknüpfung zwischen konkreten Materialeigenheiten und Modellstudien [64].

Die Berechnung des Seebeck-Koeffizienten  $S$  ist von grundsätzlichem Interesse. So führt eine geringe Konzentration magnetischer Verunreinigungen zu stark erhöhten Seebeck-Koeffizienten als Folge von magnetischen Korrelationen, auch als Kondo-Effekt bezeichnet. Solche Spinkorrelationen sind auch für die Erhöhung von  $S$  beim Transport durch Halbleiter-Quantenstrukturen verantwortlich. In komplexen oxidischen, nanostrukturierten Materialien versprechen die Nähe zum Mott-isolierenden Zustand und die damit verbundenen Korrelationseffekte eine Erhöhung des Seebeck-Koeffizienten  $S$  und des thermoelektrischen Umwandlungsfaktors  $ZT$ . Korrelationseffekte sollen im Rahmen der Dynamischen Mean-Field-Theorie [64,65,66] behandelt werden. Damit wird es möglich werden, neue strukturelle und elektronische Mechanismen zur Kontrolle dieses Koeffizienten und der effizienteren thermoelektrischen Energieumwandlung aufzuzeigen.

Modellierung und Simulation bedarf auch eines Multiskalenansatzes, der die Nanostrukturebene explizit berücksichtigt [61-63]. Dies betrifft die Untersuchung der Phononenkopplung und des Einflusses von Ordnungs- bzw. Unordnungseffekten in Übergitterstrukturen ebenso wie die Modellierung von segmentierten Anordnungen in nanostrukturierten Thermoelektrika. Im Bereich der messtechnischen Charakterisierung (KB2) werden mikrosystemtechnische Messaufbauten durch Simulationen zu betrachten und zu optimieren sein. Finite-Elemente-Modellierung an konventionellen und miniaturisierten thermoelektrischen Messanordnungen ist ein essentielles Werkzeug zur Abschätzung von Fehlereinflüssen und damit zur Verbesserung der Genauigkeit der Messergebnisse. Dies betrifft die Optimierung des Wärmeflusses in den Testobjekten, die Reduzierung von thermischen Kopplungsverlusten oder die Reduzierung bzw. Kontrolle parasitärer Wärmeflüsse. Diese Aufgaben sind klassisch der Multidomänen-Simulationen gekoppelter physikalischer Effekte, z.B. mittels Finite-Elemente-Modellierung (FEM), und der darauf aufbauenden Strukturoptimierung zuzurechnen [53,67,68].

## 2. Verhältnis zu anderen laufenden Programmen

*In Europa:* Im 7. EU-Rahmenprogramm (FP 7) taucht zum ersten Mal das Stichwort „thermoelectric“ neben „solar“ und „electrochemical“ auf – NMP-2007-2.2-3. Gefördert werden sollen „advanced materials architectures for energy conversion“. Schwerpunkt sind hier jedwede nanoskalige Strukturen, z.B. „quantum dots“ und „nanocomposites“. Die Materialentwicklung soll Eingang finden in „supercaps, stacks, solar cells und high performance batteries“. Das Programm ist anwendungsorientiert und verlangt eine hohe Industriebeteiligung. In Frankreich und der Schweiz gibt es derzeit auf nationaler Ebene verstärkt Bemühungen, die Erfor-

schung neuer thermoelektrischer Materialien und Anwendungen zu fördern. Unter der Schirmherrschaft des CNRS ist ein Forschungsverbund entstanden, an welchem 21 französische und 4 nichtfranzösische Gruppen partizipieren und gleichermaßen grundlagen- und anwendungsorientierte Fragestellungen behandeln.

*In Deutschland:* Direkte Förderprogramme oder Forschungsverbünde für die Thermoelektrik oder Ausschreibungen für thermoelektrische Nanostrukturen existieren derzeit nicht. Im Rahmen der breit ausgerichteten Förderprogramme für Nanotechnologie und Nanoscience von DFG und BMBF werden einzelne Projekte gefördert. Zum Thema thermoelektrische Nanostäbe werden ein Projekt im Rahmen des SPP 1163 am Zentrum für Schwerionenforschung in Darmstadt und ein weiteres in der FOR 522 in der Region Leipzig/Halle von der DFG gefördert. In zwei BMBF-Programmen ist eine indirekte Förderung der Thermoelektrik denkbar: Derzeit läuft die Ausschreibung "Energieautarke Mikrosysteme", in welchem die „Nutzung von Wärmeenergie“ erwähnt ist. Im Mittelpunkt des Programms steht die Systementwicklung durch Verknüpfung von drahtloser Datenübertragung, Sensorik und Thermogeneratoren auf dem heutigen Stand. Im KMU-Innovations-Programm „Nano-Chance“ wird die Umsetzung nanoskaliger Strukturen in thermoelektrischen Bauelementen angesprochen. Eine Teilnahme an derartigen Programmen ist für die meisten Teilnehmer dieses SPP-Antrags nach einem erfolgreichen Abschluss des geplanten SPP möglich.

### **3. Internationale Zusammenarbeiten**

Die Mitglieder des Programmausschusses sowie die Antragssteller stehen mit zahlreichen Forschergruppen im Ausland in Kontakt und führen gemeinsame Projekte durch.

Prof. J. Bird, University at Buffalo, State University of New York, USA  
Prof. W. E. Buhro, Washington University, St. Louis, USA  
Prof. D. Cahill, University of Champaign, Illinois, USA  
Dr. C. Gatti, ISCM, CNR, Milano, Italien  
Prof. B. B. Iversen, University Aarhus, Dänemark  
Prof. D. Johnson, University of Oregon, USA  
Prof. M. Lagally, University of Wisconsin-Madison, USA  
Dr. N. Mingo, CEA Grenoble, Frankreich  
Prof. V. Mitin, University at Buffalo, State University of New York, USA  
Prof. M. Muhammed, Royal Institute Stockholm, Schweden  
Prof. G. Nolas, University of South Florida, USA  
Prof. F. Rosei, Quebec University, Kanada  
Prof. D. M. Rowe, University of Cardiff, England  
Prof. A. Shakouri, University of California, Santa Cruz, USA  
Prof. G. J. Snyder, California Institute of Technology, USA  
Dr. J. Tersoff, IBM New York, USA  
Dr. A. Weidenkaff, EMPA, Dübendorf, Schweiz

Im Rahmen des SPP soll auch über gemeinsame Konferenzen mit anderen nationalen Verbundprogrammen in Europa (z.B. mit der Schweiz und Frankreich) nachgedacht werden.

### **4. Programmausschuss**

Den Antrag für das geplante Schwerpunktprogramm haben die Mitglieder des Programmausschusses gemeinsam vorbereitet und im Rahmen eines 1. Rundgespräches am 6.-7. September 2007 in Fulda bestätigt. Bei einem 2. Rundgespräch am 2. November 2007 in Fulda wurden von den Ausschussmitgliedern das Programm und der Antragstext im Detail ausgearbeitet. Die Ausschussmitglieder sind international ausgewiesene Wissenschaftler in der Synthese und Charakterisierung von thermoelektrischen Materialien oder Nanostrukturen, der theoretischen Festkörperphysik, Spintronik, anorganischen Chemie, thermoelektrischen Messtechnik und Mikrosystemtechnik. Dem Programmausschuss gehören vier jüngere

Wissenschaftler/innen (Fischer, Nielsch, Schlecht, Schmidt) und drei Frauen (Fischer, Mertig, Schlecht) an. Insgesamt sind die beteiligten Gruppen von einem stark materialwissenschaftlichen, festkörperphysikalischen und messtechnischen Interesse geprägt.

Der Aufruf für eine SPP-Antragsinitiative mit dem Arbeitstitel „Nanostrukturierte Thermoelektrika“ wurde im Physik Journal im Mai 2007 von K. Nielsch, H. Böttner und P. Woias initiiert. O. Eibl hat die erste Thermoelektrik-Herbstschule für Studierende in Tübingen im September 2006 organisiert. Die Fortsetzung übernimmt H. Böttner im Frühjahr 2008 in Freiburg. H. Böttner und E. Müller waren Gründungsmitglieder der Deutschen Thermoelektrischen Gesellschaft im Jahr 2005. Ferner wird H. Böttner die Internationale Thermoelektrik-Konferenz im Sommer 2009 in Freiburg organisieren. P. Ziemann und I. Mertig sind Sprecher von SFBs mit den Schwerpunkten nanostrukturierte Materialien an den Universitäten Ulm und Halle. R. Herrmann wird in Kürze eine Helmholtz-Hochschul-Nachwuchsgruppe mit dem Schwerpunkt Thermoelektrik leiten.

Bei erfolgreicher Genehmigung ist geplant, für jede Förderperiode von 3 Jahren eine Steuerungsgruppe aus drei Mitgliedern des Programmausschusses zu wählen, welche je die Interessen eines der drei Kompetenzbereiche vertreten sollen. Die Steuerungsgruppe wird zusammen mit dem Koordinator den Auftrag haben, Jahrestreffen zu organisieren, relevante Informationen innerhalb des SPP zu verteilen und sich um eine übergreifende Außendarstellung zu kümmern.

### Koordinator

|            |               |           |
|------------|---------------|-----------|
| K. Nielsch | Modellsysteme | U Hamburg |
|------------|---------------|-----------|

### Programmausschuss

|              |                                |                   |
|--------------|--------------------------------|-------------------|
| H. Buhmann   | Nanoelektronik                 | U Würzburg        |
| H. Böttner   | TE-Messtechnik, Multischichten | Fh-IPM Freiburg   |
| O. Eibl      | Strukturanalyse                | U Tübingen        |
| S.F. Fischer | Nanoelektronik                 | RU Bochum         |
| R. Herrmann  | Strukturanalyse                | FZ Jülich         |
| J. Janek     | Modelloxide                    | U Giessen         |
| I. Mertig    | Theorie                        | U Halle           |
| E. Müller    | TE-Messtechnik                 | DLR Köln          |
| S. Schlecht  | Nanopartikelsynthese           | FU Berlin         |
| O.G. Schmidt | Halbleiter-Modellsysteme       | IFW Dresden       |
| R. Schmechel | Nanopartikelsynthese           | U Duisburg        |
| P. Woias     | Mikrosystemtechnik             | IMTEK, U Freiburg |
| P. Ziemann   | TE-Rastertunnelmikroskopie     | U Ulm             |

## 5. Voraussichtliche Teilnehmer

|                |   |
|----------------|---|
| M. Albrecht    | Oberflächen- und Grenzflächenphysik, TU Chemnitz              |
| S. Barcikowski | Abt. für Nanotechnologie, Laser Zentrum e.V., U Hannover      |
| S. Blügel      | Institut für Festkörperforschung, FZ Jülich                   |
| H. Böttner     | FhI für Physikalische Messtechnik, Freiburg                   |
| K. Brunner     | Physikalisches Institut, U Würzburg                           |
| H. Buhmann     | Experimentelle Physik III, U Würzburg                         |
| A. Chudnovskiy | 1. Institut für Theoretische Physik, U Hamburg                |
| O. Eibl        | Institut für Angewandte Physik, U Tübingen                    |
| F. Endres      | Institut für Metallurgie, TU Clausthal                        |
| W. Fahrner     | Fernuniversität Hagen   |
| S.F. Fischer   | Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik, U Bochum |
| A. Greiner     | Institut für Mikrosystemtechnik IMTEK, U Freiburg             |

|                  |   |
|------------------|---|
| J. Grin          | Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe, Dresden |
| H.U. Habermeier  | Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Stuttgart          |
| W. Hansen        | Institut für Angewandte Physik - FG Wachstum, U Hamburg         |
| G. Helfferich    | Fhl für Chemische Technologie ICT, Pfinztal                     |
| R. Hermann       | Institut für Festkörperforschung, FZ Jülich                     |
| U. Hilleringmann | Inst. für Elektrotechnik und Informationstechnik, U Paderborn   |
| J. Janek         | Physikalisch-Chemisches Institut, U Giessen                     |
| C. Jooß          | Institut für Materialsphysik, U Göttingen                       |
| M. Kamlah        | Institut für Materialforschung II, FZ Karlsruhe                 |
| S. Kettemann     | 1. Institut für Theoretische Physik, U Hamburg                  |
| J. König         | Institut für Theoretische Physik III, U Bochum                  |
| C.D. Kohl        | Institut für Angewandte Physik, U Giessen                       |
| J. Korvink       | Institut für Mikrosystemtechnik IMTEK, U Freiburg               |
| H. Leipner       | Interdisziplinäres Zentrum für Materialwissenschaften, U Halle  |
| A. Lengfellner   | Inst. für Experimentelle und Angewandte Physik, U Regensburg    |
| F. Lechermann    | 1. Institut für Theoretische Physik, U Hamburg                  |
| A. Lichtenstein  | 1. Institut für Theoretische Physik, U Hamburg                  |
| S. Mathur        | Institut für Anorganische Chemie, U Würzburg                    |
| I. Mertig        | FG Theoretische Physik, U Halle                                 |
| M. Moseler       | Fraunhofer-IWM, Freiburg  |
| E. Müller        | Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, Köln                 |
| R. Neumann       | Gesellschaft für Schwerionenforschung mbH GSI, Darmstadt        |
| K. Nielsch       | Institut für Angewandte Physik, U Hamburg                       |
| M. Potthoff      | 1. Institut für Theoretische Physik, U Hamburg                  |
| N. Oeschler      | Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe, Dresden |
| A. Rastelli      | Institut für Integrative Nanowissenschaften, IFW Dresden        |
| M. Santer        | Institut für Mikrosystemtechnik IMTEK, U Freiburg               |
| S. Schlecht      | Institut für Chemie und Biochemie, FU Berlin                    |
| R. Schmechel     | Fakultät für Ingenieurwissenschaften, U Duisburg/Essen          |
| J. Schmidt       | Fhl für Fertigungstechnik und Angew. Materialforschung, Dresden |
| O.G. Schmidt     | Institut für Integrative Nanowissenschaften, IFW Dresden        |
| J. Schumann      | Institut für Integrative Nanowissenschaften, IFW Dresden        |
| W. Seifert       | FG Theoretische Physik, U Halle                                 |
| J. Siewert       | Inst. für Theoretische Physik, U Regensburg                     |
| M. Stordeur      | Interdisziplinäres Zentrum für Materialwissenschaften, U Halle  |
| R. Ulbrich       | IV. Physikalisches Institut - Halbleiterphysik, U Göttingen     |
| C.A. Volkert     | Institut für Materialsphysik, U Göttingen                       |
| F. v. Oppen      | Institut für Theoretische Physik, FU Berlin                     |
| F. Völklein      | Institut für Mikrotechnologien, FH Wiesbaden                    |
| A. Waag          | Institut für Halbleitertechnik, TU Braunschweig                 |
| H. Weller        | Institut für Physikalische Chemie, U Hamburg                    |
| D.E. Wolf        | Theoretische Physik U, Duisburg/Essen                           |
| U. Woggon        | Experimentelle Physik IIb, U Dortmund                           |
| P. Woias         | Institut für Mikrosystemtechnik IMTEK, U Freiburg               |
| M. Zacharias     | Institut für Mikrosystemtechnik IMTEK, U Freiburg               |
| P. Ziemann       | Institut für Festkörperphysik, U Ulm                            |

Der größte Teil der genannten Antragssteller traf sich am 6./7. September 2007 in Fulda zum 1. Rundgespräch. Bei dieser Veranstaltung wurden von nahezu allen Anwesenden Präsentationen aktueller Forschungsarbeiten und zukünftiger Projektideen zur Entwicklung von nanostrukturierten Modellsystemen und Materialien, zu deren Charakterisierung und Modellierung sowie zu möglichen Einsatzfeldern vorgestellt. Die Teilnehmer am Rundgespräch lobten bei der Abschlussdiskussion am 7. September vielfach die Exzellenz der häufig noch unveröffentlichten Forschungsarbeiten.

## 6. Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses

Die Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses (Doktoranden, Post-Docs) der beteiligten Arbeitsgruppen ist ein wichtiges und eigenständiges Ziel, das durch eine Reihe von Maßnahmen erreicht werden soll. Im Mittelpunkt stehen die jeweiligen Projekte, die durch ihre enge Einbindung in das Programm den Erwerb von fachlichen Qualifikationen über den engeren disziplinären Rahmen hinaus bieten sollen, so dass übergreifende Kenntnisse in Theorie, Modellbildung, Präparation Charakterisierung und Messtechnik erworben werden können.

Als besondere Maßnahmen, für die Mittel des Koordinators eingesetzt werden sollen, sind geplant:

- a. *SPP-Workshops*: Alle zwei Jahre richtet das SPP für die Projektleiter und -mitarbeiter themenorientierte fünftägige Workshops aus in Anlehnung an die Thermoelektrik-Herbstschule 2006 (Tübingen) und -Frühjahrsschule 2008 (Freiburg). Hierzu werden auch externe Vortragende eingeladen, die das Vortragsprogramm sinnvoll ergänzen. Themen für den ersten Workshop könnten „Nanostrukturierung und Modellsysteme“ oder „Theorie und Modellbildung“ sein.
- b. *Doktoranden-Workshops*: Auf diesen Workshops (jedes Jahr) stellen die Doktoranden der Projekte ihre Arbeitsfortschritte in Abwesenheit der Projektleiter vor. Fortgeschrittene Mitarbeiter erhalten die Aufgabe, zu speziellen Themen kurze Tutorien abzuhalten. Auch hier können externe Redner zu speziellen Themen eingeladen werden. Zur Organisation dieser Veranstaltung werden am Anfang einer jeden Förderperiode zwei Nachwuchssprecher gewählt.
- c. *Mentorensystem*: Für die Doktoranden im SPP soll ein Mentorensystem installiert werden, um ihre Betreuung umfassend zu gewährleisten und den Austausch zwischen den SPP-Gruppen zu fördern. In der Regel sollen Mentoren und Doktoranden sich zweimal pro Jahr persönlich treffen, wofür separate Reisemittel reserviert werden sollen.
- d. *Cluster-Treffen*: Es wird notwendig sein, zur Erörterung spezieller Probleme oder Aufgaben Teilnehmer des Programms relativ kurzfristig zu eintägigen Arbeitstreffen zu versammeln. Hierfür sind Mittel vorzusehen.
- e. *Mess-/Arbeitsaufenthalte*: Mitarbeiter sollen die Gelegenheit erhalten, für eine kürzere Phase (1 – 2 Wochen) in kooperierenden Arbeitsgruppen mitzuarbeiten, um sich dort schneller in neue Modellsysteme, Modelle oder Methoden einarbeiten zu können.
- f. *Dokumentation*: Um einen nachhaltigen Wissenstransfer zu erreichen sollen zu den themenorientierten Workshops Skripte erstellt werden, die sich besonders den Grundlagen der nanostrukturierten Thermoelektrik widmen.
- g. *SPP-Homepage*: Die Kommunikation innerhalb des SPP soll durch eine Internet-Plattform unterstützt werden. Diese soll auch der Öffentlichkeit zur Information dienen.

Aufgrund des stark interdisziplinär ausgerichteten Programms werden wir promovierte Nachwuchswissenschaftler verstärkt ermutigen, eigene Anträge in Zusammenarbeit mit anderen Gruppen im Rahmen dieses Schwerpunktprogramms zu stellen. Ferner sind an der Antragsausarbeitung zahlreiche für eine Berufung qualifizierte Nachwuchswissenschaftler (S.F. Fischer, R. Herrman, C. Jooß, S. Kettemann) und in den vergangenen zwei Jahren berufene Professoren beteiligt (F. Lechermann, K. Nielsch, S. Schlecht, R. Schmechel, O. G. Schmidt, C.A. Volkert, M. Zacharias, M. Potthoff). Die jüngste Ernennung von R. Hermann zum Leiter einer Helmholtz-Hochschul-Nachwuchsgruppe zeigt, dass die Thermoelektrik ein Betätigungsfeld mit Zukunft für Nachwuchswissenschaftler ist. Ebenso wie die Photovoltaik übt die Thermoelektrik als regenerative Energie eine besondere Faszination auf Studierende aus. Bisher konnten nur im begrenzten Maße in den Arbeitsgruppen entsprechende Diplom- oder Masterarbeiten angeboten werden. Die Nachfrage übersteigt häufig die Betreuungsmöglichkeiten. Durch das SPP könnten mehr Plätze für Bachelor-, Master- und Diplomarbeiten an Universitäten zu dieser Thematik bereitgestellt werden.

## 7. Förderperiode

Antragsdauer: 6 Jahre

Geplante Förderperioden: 2 x 3 Jahre

## 8. Schätzung des Mittelsbedarfs

Aufgrund der oben genannten Themengebiete und der durch eine große Anzahl von Publikationen ausgewiesenen potenziellen Teilnehmer wird eine Anzahl von 10-15 Verbundprojekten angestrebt, welche sich aus 2 bis 4 Partnern zusammensetzen und sich über alle drei Kompetenzbereiche (KB1-3) innerhalb eines Verbundprojektes verteilen sollen. Für die Abschätzung der Personalkosten wurde der Tarifvertrag der Länder berücksichtigt.

|                              |  |                    |
|------------------------------|--|--------------------|
| Personalmittel:              | 10x TVL E13                            | 588.000 €          |
|                              | 15x TVL E13 (3/4 Stellen)              | 658.000 €          |
|                              | 10x TVL E13 (1/2 Stellen)              | 294.000 €          |
| Verbrauchsmittel:            | 10.000 €/Teilprojekt                   | 300.000 €          |
| Investitionen                | 40.000 € pro Teilprojekt/Förderperiode | 400.000 €          |
| Reisekosten                  | Projektpartnertreffen und Konferenzen  | 75.000 €           |
| <b>Gesamtkosten pro Jahr</b> |  | <b>2.315.000 €</b> |

Aufgrund des individuellen Grades der Ausbildung und des Tätigkeitsbereichs werden für einen Teil der Mitarbeiter volle Stellen für Postdoktoranden und in besonderen Fällen für Doktoranden benötigt. Ferner wurde eine Differenzierung für Doktoranden zwischen den üblichen Gehältern in Physik- (3/4 Stellen), Chemie- (1/2 Stellen) und den ingenieurwissenschaftlichen Fachbereichen (volle Stellen) berücksichtigt. Für die projektspezifische Ergänzungsausstattung, vor allem zum Aufbau thermoelektrischer Charakterisierungsmethoden in den meist auf Materialsynthese spezialisierten Projektgruppen und für die Verbesserung der Syntheseverfahren und theoretischen Modellentwicklung sind Investitionen erforderlich. Für die zentrale Verwaltung des geplanten Schwerpunkts und die Öffentlichkeitsarbeit sind weitere Personalmittel (1x TVL Vc) erforderlich.

## 9. Gründe für die Förderung des Programms

Thermoelektrische Nanostrukturen können als regenerative/recycelnde Energieerzeugung oder als effiziente miniaturisierte Kühlelemente eingesetzt werden. Sie stellen damit eine Materialklasse hochaktueller Forschung mit besonders innovativem Anwendungspotential dar. Für die Thermoelektrik, basierend auf Dünnschichttechniken und Nanokompositen, werden heute schon neue Anwendungen z.B. bei der Stromerzeugung aus Restwärme, bei der Datenübertragung und bei netzautarken elektronischen Bauelementen erprobt. In Anlehnung an die Entwicklung der Photovoltaik und Lithiumionenbatterie sind in den kommenden Jahrzehnten effizientere ( $ZT=1,5-2$ ) und gewichtsreduzierte Thermogeneratoren erforderlich, was ausschließlich mit einem besseren Verständnis und einer besseren Kontrolle der physikalischen Effekte erzielt werden kann.

Die Forschung und Entwicklung nanostrukturierter Thermoelektrika findet international hohe Beachtung, wie die steigende Zahl an wissenschaftlichen Veranstaltungen zu dieser Thematik oder Spezialausgaben wissenschaftlicher Journale (z.B. MRS Bulletin März 2006 und Physica Status Solidi, Rapid Research Letters, November 2007) dokumentieren. Bisher werden 80% der kommerziellen thermoelektrischen Bauelemente zur Kühlung und 20% in der Stromerzeugung angewendet. Die jetzigen Förderprogramme zielen vor allem auf eine

Vervielfachung der Absatzmärkte im Bereich Stromerzeugung ab. In den USA z.B. wird die Forschungsförderung für Thermoelektrika auf >>20 M€ pro Jahr geschätzt. China und Japan stehen dem in keiner Weise nach.

Deutschland war jahrzehntelang international führend in der Forschung und Entwicklung von thermoelektrischen Materialien und Dünnschichten, die an zahlreichen Lehrstühlen in Konstanz, Halle, Dresden, Chemnitz und Karlsruhe bis in die 1990er Jahre hinein stattfand. Dieses SPP soll unter neuen Vorzeichen mit einem eindeutigen Fokus auf thermoelektrische Effekte auf der nm-Skala die Grundlagenforschung an den Universitäten in Deutschland fördern. Für einen erfolgreichen Ausbau seiner Position in der Thermoelektrik hat Deutschland beste Voraussetzungen: thermoelektrische Stützpunkte sowie hervorragende Infrastruktur in der Halbleiter- und Festkörperphysik, in Materialforschung und Nanotechnologie. Ferner zeigt die Entscheidung der „International Thermoelectric Society“, die internationale Thermoelektrikkonferenz 2009 in Freiburg zu organisieren, eine große Anerkennung für die allgemeine Thermoelektrikforschung in Deutschland. Im Falle einer Genehmigung dieses SPP-Antrags soll im Rahmen der Thermoelektrikkonferenz 2009 die SPP-Auftaktveranstaltung mit allen Projektpartnern in Freiburg stattfinden.



Das 1. Rundgespräch zum vorliegenden Antrag mit mehr als 40 Teilnehmern aus ca. 30 Arbeitsgruppen, welches am 6./7. September 2007 in Fulda stattfand, zeigt nicht nur das breite Interesse in Deutschland für die Thermoelektrik auf mesoskopischer Skala, sondern ließ auch das große Potential an wissenschaftlicher Kompetenz erkennen, das für eine erfolgreiche gemeinschaftliche Bearbeitung erforderlich ist. Deutschland hat die Chance, über den Status eines „Fast-Followers“ hinaus mit einer grundlagenorientierten Fokussierung auf thermoelektrische Modellsysteme langfristige Perspektiven zu schaffen. In der Diskussion bei der Antragsvorbereitung wurde dieser Aspekt von amerikanischen Fachkollegen besonders hervorgehoben.

Um in Deutschland Anschluss an die rasanten internationalen Entwicklungen zu erlangen und das Forschungspotential auf nationaler Ebene optimal auszuschöpfen, ist ein außerordentlicher Grad an interdisziplinärer und überregionaler Vernetzung erforderlich, wie dies nur durch ein DFG-Schwerpunktprogramm geleistet werden kann. Komplexe wissenschaftliche Fragestellungen sollen interdisziplinär mit Wissenschaftlern aus den Bereichen Chemie, Physik, Materialwissenschaften, Theorie und Elektrotechnik erarbeitet werden. Im Rahmen dieses SPP sollen neue Konzepte theoretisch und experimentell an physikalischen Modellsystemen erarbeitet, neuartige Nanostrukturen durch Verknüpfung von zahlrei-

chen chemischen und physikalischen Syntheseverfahren entwickelt sowie eine standardisierte thermoelektrische Analytik für Nanomaterialien in Deutschland aufgebaut werden. Im begrenzten Umfang sollen in der 2. Förderperiode mit Hilfe der Mikrosystemtechnik diese experimentellen Modellsysteme auch an neuartige Anwendungen herangeführt werden.

## 10. Literatur

1. <http://eed.llnl.gov/flow>.
2. J. Sommerlatte, K. Nielsch, H. Böttner, *Physik Journal* **6**, Nr. 5, 34-42 (2007).
3. H. Böttner, J. Nurnus, A. Gavrikov, G. Kühner, M. Jägler, C. Künzel, D. Eberhard, G. Plescher, A. Schubert, K.H. Schlereth, *Journal of Microelectromechanical Systems* **13**, 414 (2004).
4. G.S. Nolas, J. Sharp, H.J. Goldsmid, *Thermoelectrics – Basic Principles and New Materials Developments*, Springer, Berlin (2001).
5. T.M. Tritt et al., *MRS Bulletin* **31**, 188 (2006).
6. A.F. Ioffe, *Semiconductor Thermoelements and Thermoelectric Cooling*, Infosearch Limited London (1957).
7. E. Altenkirch, *Physikalische Zeitschrift* **16**, 560 (1909).
8. D.M. Rowe (Editor), *Thermoelectrics Handbook: Macro to Nano*, CRC Handbook, Taylor & Francis (2006).
9. H.J. Goldsmid und R.W. Douglas, *British Journal of Applied Physics* **5**, 386 (1954).
10. J. Martin, G.S. Nolas, W. Zhang, L. Chen, *Applied Physics Letters* **90**, 222112 (2007).
11. D. Vashaee, A. Shkouri, *Journal of Applied Physics* **101**, 053719 (2007).
12. P.N. Alboni, X.Ji, J. He, N. Gothard, J. Hubbard, T.M. Tritt, *Journal of Electronic Materials* **36**, 711-715 (2007).
13. M. Christensen, N. Lock, J. Overgaard, B.B. Iversen, *Journal of the American Chemical Society* **128**, 15657-15665 (2006).
14. D.I. Bilc, S.D. Mahanti, M.G. Kanatzidis, *Physical Review B* **74**, 125202 (2006).
15. A.L. Pilchak, F. Ren, E.D. Case, E.J. Timm, H.J. Schock, C.I. Wu, T.P. Hogan, *Philosophical Magazine* **87**, 4567-4591 (2007).
16. J. Androulakis, K.F. Hsu, R. Pcionek, H. Kong, C. Uher, J.J. D'Angelo, A. Downey, T. Hogan, M.G. Kanatzidis, *Advanced Materials* **18**, 1170-1173 (2006).
17. B.A. Cook, X.Z. Wei, J.L. Harringa, M.J. Kramer, *Journal of Materials Science* **42**, 7643-46 (2007).
18. R. Funahashi, S. Urata, *International Journal of Applied Ceramic Technology* **4**, 297-307 (2007).
19. R. Funahashi, M. Mikami, T. Mihara, S. Urata, N. Ando, *Journal of Applied Physics* **99**, 066117 (2006).
20. A.M. Rao, X. Ji, T.M. Tritt, *MRS Bulletin* **31**, 218 (2006).
21. T. Harris, H. Lee, D.Z. Wang, J.Y. Huang, Z.F. Ren, B. Klotz, R. Dowding, M.S. Dresselhaus, G. Chen, *Mater. Res. Soc. Symposium Proceedings* **793**, 169-74. (2004).
22. X.F. Tang, W.J. Xie, H. Li, W.Y. Zhao, Q.J. Zhang, M. Niino, *Applied Physics Letters* **90**, 012102 (2007).
23. F.R. Harris, S. Standridge, C. Feik, D.C. Johnson, *Angewandte Chemie, International Edition* **42**, 5296 (2003).
24. L.D. Hicks, M.S. Dresselhaus, *Physical Review B* **47**, 16631-4 (1993).
25. Y.M. Lin, X. Sun, M. S. Dresselhaus, *Physical Review B* **62**, 4610-4623 (2000).
26. Z. Zhang, J.Y. Ying, M.S. Dresselhaus, *Journal of Materials Research* **13**, 1745-8 (1998).
27. M. Martín-González, A.L. Prieto, M.S. Knox, R. Gronsky, T. Sands, A.M. Stacy, *Chemistry of Materials* **15**, 1676-81 (2003).
28. M. Martín-González, A.L. Prieto, R. Gronsky, T. Sands, A.M. Stacy, *Advanced Materials* **15**, 1003-1006 (2003).
29. M. A. Ryan, J.P. Fleurial, *The Electrochemical Society Interface* **11**, 30-34 (2002).
30. D.A. Borca-Tasciuc, G. Chen, A. Prieto, M.S. Martín-González, A. Stacy, T. Sands, M. A. Ryan, J.P. Fleurial, *Applied Physics Letters* **85**, 6001 (2004).
31. L. Yu-Ming, O. Rabin, S.B. Cronin, J.Y. Ying, M.S. Dresselhaus, *Applied Physics Letters* **81**, 2403-5 (2002).
32. J. Keyani, A.M. Stacy, J. Sharp, *Applied Physics Letters* **89**, 233106 (2006).

33. L. Yu-Ming, M.S. Dresselhaus, *Physical Review B* **68**, 75304-1-14 (2003).
34. B. Yoo, F. Xiao, K.N. Bozhilov, J. Herman, M.A. Ryan, N.V. Myung, *Advanced Materials* **19**, 296-299 (2007).
35. R. Venkatasubramanian, E. Siivala, T. Colpitts, B. O'Quinn, *Nature* **413**, 597 (2001).
36. T.C. Harman, P.J. Taylor, M.P. Walsh, B.E. LaForge, *Science* **297**, 2229 (2002).
37. W. Kim, J. Zide, A. Gossard, D. Klenov, S. Stemmer, A. Shakouri, A. Majumdar, *Physical Review Letters* **96**, 045901 (2006).
38. Drucksache 3750/98, Geschäftsstelle des WR, Köln, 4.1.1999.
39. H. Böttner, J. Nurnus, A. Gavrikov, G. Kühner, M. Jägler, C. Künzel, D. Eberhard, G. Plescher, A. Schubert, K.H. Schlereth, *IEEE Journal of Microelectromechanical Systems* **13**, 414 (2004).
40. H. Böttner, G. Chen, R. Venkatasubramanian, *MRS Bulletin* **31**, 211 (2006).
41. S.F. Godijn, S. Möller, H. Buhmann, L.W. Molenkamp, S. van Lampen, *Physical Review Letters* **82**, 2927 (1999).
42. S. Möller, H. Buhmann, S.F. Godijn, L.W. Molenkamp, *Physical Review Letters* **81**, 5197 (1998).
43. R. Scheibner, E.G. Novik, T. Borzoko, M. König, D. Reuter, A.D. Wieck, H. Buhmann, L.W. Molenkamp, *Physical Review B* **75**, 41301 (2007).
44. R. Scheibner, H. Buhmann, D. Reuter, M.N. Kiselev, L.W. Molenkamp, *Physical Review Letters* **95**, 176602 (2005).
45. W. Schweika, R.P. Hermann, M. Prager, J. Perßon, V. Keppens, *Physical Review Letters* **99**, 125501 (2007).
46. G.J. Snyder, M. Christensen, E. Nishibori, T. Caillat, *Nature Materials* **3**, 458-463 (2004).
47. B.L. Gallagher, T.T. Heikkilä, A. Luukanen, A.M. Savin, J.P. Pekola, *Physical Review Letters* **64**, 2058 (1990).
48. L.W. Molenkamp, H. van Houten, C.W.J. Beenakker, R. Eppenga, C.T. Foxon, *Physical Review Letters* **65**, 1052 (1990).
49. J. Xu, B. Koslowski, R. Möller, K. Läger, K. Dransfeld, I.H. Wilson, *Journal of Vacuum Science and Technology B* **12**, 2156 (1994).
50. B. Koslowski, C. Baur, *Journal of Applied Physics* **77**, 28 (1995).
51. A. Rettenberger, C. Baur, K. Läger, D. Hoffmann, J.Y. Grand, R. Möller, *Applied Physics Letters* **67**, 1217 (1995).
52. P. Reddy, S.Y. Jang, R. A. Segalman, A. Majumdar, *Science* **315**, 1568 (2007).
53. N. Kockmann, T. Huesgen, P. Woias, *IEEE Transducers 2007*, Digest Technical Papers, 133-136 (2007).
54. G. Chen, *Recent Trends in Thermoelectric Materials Research, Semiconductors and Semimetals*, edited by T. M. Tritt, Vol. **71**, Academic Press, San Diego, 2001.
55. S.M. Lee, D.G. Cahill, T.H. Allen, *Physical Review B* **52**, 253 (1995).
56. *Anderson Localization and its Ramifications: Disorder, Phase Coherence and Electron Correlations*, edited by T. Brandes, S. Kettmann, Lecture Notes in Physics, Springer (Berlin) (2003).
57. T. Vojta, I. Mertig, R. Zeller, *Physical Review B* **46**, 15761 (1992).
58. I. Mertig, *Reports of Progress in Physics* **62**, 1 (1999).
59. A. Bagrets, N. Papanikolaou, I. Mertig, *Physical Review B* **70**, 064410 (2004).
60. C. Heiliger, M. Gradhand, P. Zahn, I. Mertig, *Physical Review Letters* **99**, 066804 (2007).
61. M. Moseler, P. Gumbsch, C. Casiraghi, A. Ferrari, J. Robertson, *Science* **309**, 1545 (2005).
62. P. Zahn, I. Mertig, R. Zeller, P. H. Dederichs, *Materials Research Society. Symposium Proceedings* **475**, 525 (1997).
63. M. Moseler, U. Landman, *Science* **289**, 1165 (2000).
64. F. Lechermann, S. Biermann, A. Georges, *Physical Review Letters* **94**, 166402 (2005).
65. A.I. Poteryaev, A.I. Lichtenstein, G. Kotliar, *Physical Review Letters* **93**, 086401 (2004).
66. V.I. Anisimov, F. Aryasetiawan, and A.I. Lichtenstein, *Journal of Physics: Condensed Matter* **9**, 767 (1997).
67. N. Kockmann, M. Engler, D. Haller, P. Woias, *Heat Transfer Engineering* **26**, 71 (2005).
68. J. Mueller, J.G. Korvink, *Journal of Computational Physics* **196**, 145 (2004).

## 11. Ausgewählte Vorarbeiten von Teilnehmern

### AG M. Albrecht (TU Chemnitz)

- M. Albrecht, G. H. Hu, I. L. Guhr, T. C. Ulbrich, J. Boneberg, P. Leiderer, G. Schatz, "Magnetic multilayers on nanospheres", *Nature Materials* 4, 203 (2005).
- S. Teichert, S. Schwendler, D. K. Sarkar, A. Mogilatenko, M. Falke, G. Beddies, C. Kleint, H. J. Hinneberg, "Growth of MnSi<sub>1.7</sub> on Si(001) by MBE", *J. Cryst. Growth* 227, 882 (2001).
- S. Teichert, D. K. Sarkar, S. Schwendler, H. Giesler, A. Mogilatenko, M. Falke, G. Beddies, H. J. Hinneberg, "Preparation and properties of MnSi<sub>1.7</sub> on Si(001)", *Microelectronic Engineering* 55, 227 (2001).

### AG S. Barcikowski (U Hannover)

- S. Barcikowski, A. Menéndez-Manjón, B. Chichkov, M. Brikas, G. Račiukaitis, "Generation of nanoparticle colloids by picosecond and femtosecond laser ablation in liquid flow", *Appl. Phys. Lett.* 91, 083113 (2007).
- S. Barcikowski, A. Hahn, A.V. Kabashin, B.N. Chichkov, "Properties of nanoparticles generated during femtosecond laser machining in air and water", *Appl. Phys. A* 87, 47-55 (2007).

### AG H. Böttner (FhI Freiburg)

- H. Böttner, J. Nurnus, A. Gavrikov, G. Kühner, M. Jägler, C. Künzel, D. Eberhard, G. Plescher, A. Schubert, K.-H. Schlereth, "New thermoelectric components using microsystem technologies", *IEEE J. of Microelectrom. Syst.*, 13 (3), 414 (2004).

### AG K. Brunner (U Würzburg)

- S. Mahapatra, T. Kiessling, E. Margapoti, G. V. Astakhov, W. Ossau, L. Worschech, A. Forchel, and K. Brunner, "Formation mechanism and properties of CdSe quantum dots on ZnSe by low temperature epitaxy and in-situ annealing", *Appl. Phys. Lett.* 89, 043102 (2006).
- P. H. Tan, D. Bougeard, G. Abstreiter, and K. Brunner, "Depth Profile of strain and composition in Si/Ge dot multilayers by microscopic phonon Raman spectroscopy", *J. Appl. Phys.* 98, 113517 (2005).
- K. Brunner, O. G. Schmidt, W. Winter, K. Eberl, M. Glück, and U. König, "SiGeC: bandgaps, bandoffsets, optical properties and potential applications", *J. Vac. Sci. & Technol. B* 16, 1701 (1998).

### AG H. Buhmann (U Würzburg)

- R. Scheibner, H. Buhmann, D. Reuter, M. N. Kiselev, L. W. Molenkamp, "Thermopower of a Kondo Spin-Correlated Quantum Dot", *Phys. Rev. Lett.* 95, 176602 (2005).
- R. Scheibner, E.G. Novik, T. Borzoko, M. König, D. Reuter, A.D. Wieck, H. Buhmann, L.W. Molenkamp, "Sequential and cotunneling behavior in the temperature-dependent thermopower of few-electron quantum dots", *Phys. Rev. B* 75, 41301 (2007).

### AG O. Eibl (U Tübingen)

- N. Peranio and O. Eibl, "Quantitative EDX micro-analysis of Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> in the TEM", *Phys. Status. Sol. A* 204, 3243 (2007).
- N. Peranio, O. Eibl, J. Nurnus, "Structural and thermoelectric properties of epitaxially grown Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> thin films and superlattices", *J. Appl. Physics* 100, 114306 (2006).
- Eyidi, D. Maier, O. Eibl, M. Westphal, "Chemical composition and crystal lattice defects of Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> Peltier Device Structures", *Phys. Stat. Sol.* 187, 585 (2001).

### AG F. Endres (TU Clausthal)

- F. Endres, S. Zein El Abedin, "Air and Water Stable Ionic Liquids in Physical Chemistry", *Phys. Chem. Phys.* 8, 2101 (2006).
- S. Zein El Abedin, E. M. Moustafa, R. Hempelmann, H. Natter, F. Endres, "Electrodeposition of nano- and microcrystalline aluminium in some water and air stable ionic liquids", *Chem. Phys. Chem.* 7, 1535 (2006).

### AG W. Fahrner (FU Hagen)

- H.-C. Neizert, M. Ferrara, W. Fahrner, M. Scherff, E. Bobeico, F. Roca, L. Serenelli, M. Tucci, "Stability of

silicon based homojunction and heterojunction solar cells under space conditions", *Mat. Sci. Eng. B – Solid State Mat. Adv. Techn.* 134, 263S1 (2006).

- T. Mueller, W. Duengen, Y. Ma, R. Job, M. Scherff, W. R. Fahrner, "Investigation of the emitter band gap widening of heterojunction solar cells by use of hydrogenated amorphous carbon silicon alloys", *J. Appl. Phys.* 102, 074505 (2007).

### AG S. F. Fischer (U Bochum)

- S. F. Fischer, G. Apetrii, U. Kunze, et al. "Energy spectroscopy of controlled coupled quantum-wire states", *Nature Phys.* 2, 91 (2006).
- G. Apetrii, S. F. Fischer, U. Kunze, D. Reuter, A. D. Wieck, "Influence of processing parameters on the transport properties of quantum point contacts fabricated with an atomic force microscope", *Semicond. Sci. Technol.* 17, 735 (2002).

### AG J. Grin (MPI Dresden)

- V. Pacheco, A. Bientien, W. Carrillo-Cabrera, S. Paschen, F. Steglich, and Yu. Grin, "Relationship between composition and charge carrier concentration in Eu<sub>8</sub>Ga<sub>16-x</sub>Ge<sub>30+x</sub> clathrates", *Phys. Rev. B* 71, 165205 (2005).
- G.S. Nolas and H.J. Goldsmid, "The figure of merit in amorphous thermoelectrics", *Phys. Stat. Sol. (a)* 194, 271 (2002).

### AG H.U. Habermeier (MPI Stuttgart)

- H.-U. Habermeier, X. H. Li, P. X. Zhang, B. Leibold, "Anisotropy of thermoelectric properties in La<sub>2/3</sub>Ca<sub>1/3</sub>MnO<sub>3</sub> thin films studied by laser-induced transient voltages", *Solid State Commun.* 110, 473 (1999).
- H. Lengfellner, G. Kremb, A. Schnellbogl, J. Betz, K. F. Renk, W. Prettl, "Giant voltages upon surface heating in normal YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-δ</sub> films suggesting an atomic layer thermopile films suggesting an atomic layer thermopile", *Appl. Phys. Lett.* 60, 501 (1992).

### AG W. Hansen (U Hamburg)

- O. Schumacher, S. Mendach, H. Welsch, A. Schramm, Ch. Heyn, and W. Hansen, "Lithographically defined metal-semiconductor-hybrid nanoscrolls", *App. Phys. Lett.* 86, 143109 (2005).
- S. Mendach, O. Schumacher, Ch. Heyn, S. Schnüll, H. Welsch, and W. Hansen, "Preparation of curved two-dimensional electron systems in InGaAs/GaAs-microtubes", *Physica E* 23, 274 (2004).

### AG G. Helferich (FhI Pfinztal)

- T. Scholz, J. Seewig, E. Reithmeier, G. Helferich, "Explosive embossing of holographic structures", *International Society for Optical Engineering (SPIE) Europe – Optical Metrology, Munich, June 18-22, 2007*

### AG R. Hermann (FZ Jülich)

- W. Schweika, R. P. Hermann, M. Prager, J. Perßon, and V. Keppens, "Dumbbell rattling in thermoelectric zinc-antimony", *Phys. Rev. Lett.*, to appear September 2007.
- R. P. Hermann, F. Grandjean, T.-C. Chen, D. E. Brown, C. E. Johnson, G. J. Snyder, and G. J. Long, "Antimony-121 Mössbauer Spectral Study of α-Zn<sub>4</sub>Sb<sub>3</sub>", *Inorg. Chem.* 46, 767 (2007).
- R. P. Hermann, W. Schweika, O. Leupold, R. Ruffer, G. S. Nolas, F. Grandjean, and G. J. Long, "Neutron and Nuclear Inelastic Scattering Study of Einstein Oscillators in Ba-, Sr-, and Eu-filled germanium clathrates", *Phys. Rev. B* 72, 174301 (2005).

### AG Hilleringmann (U Paderborn)

- J. L. Jiang, U. Hilleringmann, X. P. Shui, "Electro-thermo-mechanical analytical modeling of multilayer cantilever microactuator", *Sensors and Actuators A - Physical* 137, 302 (2007).
- Industrieprojekt "Thermogeneratoren auf Chipkarten und Folien" (Industriepartner: O-flexx Technologies GmbH).

**AGs J. Janek, C. Korte, C.D. Kohl (U Giessen)**

- H. Timm and J. Janek, "On the Soret effect in binary nonstoichiometric oxides – Kinetic demixing of cuprite in a temperature gradient", *Solid State Ionics* 176, 1131 (2005).
- M. Vennekamp and J. Janek, "Ionic Thermopower of composite electrolytes. I. Theory", *Solid State Ionics* 118, 43 (1999)
- C. Korte and J. Janek, "Ionic conductivity, partial thermopowers, heats of transport and the Soret effect of  $\alpha$ -Ag<sub>2+6</sub>Se - An experimental study", *Z. Phys. Chem.* 206, 129 (1998).
- J. Janek, "Thermal diffusion in crystalline binary compounds with narrow range of homogeneity: I. A new experiment for the determination of the heat of transport", *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* 99, 920 (1995).
- C. Krummel, A. Freiling, R. Schmidt, J. Kelleter, H. Wollnik, C. D. Kohl, "Induced Zinc desorption from Zinc-Oxide during exposure to a reducing agent", *Fresenius J. Analyt. Chem.* 353, 521 (1995).

**AGs C. Jooß (U Göttingen)**

- Ch. Jooss, L. Wu, T. Beetz, R. F. Klie, M. Beleggia, M. A. Schofield, S. Schramm, J. Hoffmann, Y. Zhu, "Polaron melting and ordering as key mechanisms for colossal resistance effects in manganites", *PNAS*, 104, 13597 (2007).

**AG S. Kettemann (U Hamburg)**

- S. Kettemann, J.-F. Guillemoles, "Thermoelectrical Field Effects in Low Dimensional Structure Solar Cells", *Physica E* 14, 101 (2002) in the Special Issue on Nanostructures in Photovoltaics, ed. by J. Nelson, S. Kettemann, R. Corkish, *Physica E* 14 (2002).

**AG J. König (U Bochum)**

- B. Kubala, J. König, and J. Pekola, "Violation of Wiedemann-Franz Law in a Single-Electron Transistor", arXiv:0709.4181, submitted to *Phys. Rev. Letters*
- B. Kubala and J. König, "Quantum-Fluctuation Effects in the Thermopower of a Single-Electron Transistor", *Phys. Rev. B* 73, 195316 (2006).

**AG H. Leipner (U Halle)**

- J. Bauer, V. Gottschalch, H. Paetzelt, G. Wagner, B. Fuhrmann and H.S. Leipner, "MOVPE growth and real structure of vertical-aligned GaAs nanowires.", *J. Cryst. Growth* 298, 625 (2007).
- H. J. Fan, B. Fuhrmann, R. Scholz, C. Himcinschi, A. Berger, H. Leipner, A. Dadgar, A. Krost, S. Christiansen, U. Gösele and M. Zacharias, "Vapour-transport-deposition growth of ZnO nanostructures: switch between c-axial wires and a-axial belts by indium doping", *Nanotechnol.* 17, S231(2006).
- B. Fuhrmann, H. S. Leipner, H.-R. Hoche, L. Schubert, P. Werner, U. Gösele, "Ordered arrays of silicon nanowires produced by nanosphere lithography and molecular beam epitaxy", *Nano Lett.* 5, 2524 (2005).

**AG H. Lengfellner (U Regensburg)**

- A. Kyarad and H. Lengfellner, "Transverse Peltier effect in tilted Pb-Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> multilayer structures", *Appl. Phys. Lett.* 89, 192103 (2006).
- A. Kyarad and H. Lengfellner, "Al-Si multilayers: A synthetic material with large thermoelectric anisotropy", *Appl. Phys. Lett.* 85, 5613 (2004).

**AG S. Mathur (U Würzburg)**

- S. Mathur, V. Sivakov, H. Shen, S. Barth, C. Cavalius, A. Nilsson, P. Kuhn, "Nanostructured films of iron, tin and titanium oxides by chemical vapor deposition", *Thin Solid Films* 502, 88 (2006).
- S. Mathur, S. Barth, H. Shen, J. C. Pyun, U. Werner, "Size-Dependent Photoconductance in SnO<sub>2</sub> Nanowires" *Small* 1, 713 (2005).
- S. Mathur, H. Shen, V. Sivakov, U. Werner, "Germanium nanowires and core-shell nanostructures by chemical vapor deposition of [Ge(C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>]", *Chem. Mater.* 16, 2449 (2004).

**AG I. Mertig (U Halle)**

- C. Heiliger, M. Gradhand, P. Zahn, and I. Mertig, "Tunneling magnetoresistance on the subnanometer scale", *Phys. Rev. Lett.* 99, 066804 (2007).
- I. Mertig, "Transport properties of dilute alloys", *Rep. Prog. Phys.* 62, 1 (1999).
- P. Zahn, I. Mertig, R. Zeller, and P. H. Dederichs "Tight binding KKR - application to CoCu(001): Electronic structure and transport", *Mat. Res. Soc. Symposium Proc.* Vol. 475, 525 (1997).
- T. Vojta, I. Mertig, and R. Zeller, "Thermopower of dilute Silver alloys", *Phys. Rev. B* 46, 15761 (1992).

**AG E. Müller (DLR Köln)**

- Z. He, C. Stiewe, D. Platzek, G. Karpinski, E. Müller, S. Li, M. Toprak, and M. Muhammed, "Nano ZrO<sub>2</sub>/CoSb<sub>3</sub> composites with improved thermoelectric figure of merit", submitted to *Applied Physics Letters*.
- X. B. Zhao, H. Y. Chen, E. Müller, C. Drašar, "Thermoelectric properties of Mn doped FeS<sub>1-x</sub> alloys hot pressed from nitrified rapidly solidified powders", *Appl. Phys. A* 80 (5), 1123 (2005).
- N. Chen, F. Gascoin, E. Müller, G. Karpinski, C. Stiewe, G. J. Snyder, "Macroscopic Thermoelectric Inhomogeneities in (AgSbTe<sub>2</sub>)<sub>x</sub>(PbTe)<sub>1-x</sub> materials", *Appl. Phys. Lett.* 87, 171903 (2005)

**AG R. Neumann (GSI Darmstadt)**

- T.W. Cornelius, M.E. Toimil-Molares, R. Neumann, S. Karim, "Finite-size effects in transport properties of single bismuth nanowires", *J. Appl. Phys.* 100, 114307 (2006).
- T.W. Cornelius, M.E. Toimil-Molares, R. Lovrincic, S. Karim, R. Neumann, A. Pucci, G. Fahsold, "Quantum confinement effects manifest in infrared properties of single bismuth nanowires", *Appl. Phys. Lett.* 88, 103114 (2006).
- T.W. Cornelius, J. Brötz, N. Chtanko, D. Dobrev, G. Mieke, R. Neumann, M.E. Toimil-Molares, "Controlled fabrication of poly- and single-crystalline bismuth nanowires", *Nanotechnology* 16, S246 (2005).

**AG K. Nielsch (U Hamburg)**

- J. Sommerlatte, W. Lee, R. Scholz, U. Gösele, K. Bente and K. Nielsch, "Electrochemically-Deposited Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub> and Pb<sub>3</sub>Bi<sub>2</sub>(1-X)S<sub>3</sub> Nanowires", *Proc. 25th Intern. Conf. Thermoelectrics*, im Druck (2007).
- O. Rabin, K. Nielsch und M.S. Dresselhaus, "Enhancement of Weak Anti-localization Signatures in the Magneto-resistance of Bismuth Anti-dot Thin Films", *Applied Physics A, Materials Science & Processing*, 82, 471 (2006).
- W. Lee, R. Ji, U. Gösele und K. Nielsch, "Fast fabrication of long-range ordered porous alumina membranes by hard anodization", *Nature Materials* 5, 741 (2006).

**AG N. Oeschler (MPI Dresden)**

- U. Köhler, A. P. Pikul, N. Oeschler, T. Westerkamp, A. M. Strydom, F. Steglich, "Low-temperature study of the strongly correlated compound Ce<sub>3</sub>Rh<sub>4</sub>Sn<sub>13</sub>", *J. Physics-Cond. Mat.* 19, 38207 (2007).
- R. Küchler, P. Gegenwart, F. Weickert, N. Oeschler, T. Cichorek, M. Nicklas, N. Carocca-Canales, C. Geibel, F. Steglich, "Thermal expansion and Grüneisen ratio near quantum critical points", *Physica B* 378-80, 36 (2006).
- S. Hartmann, U. Köhler, N. Oeschler, S. Paschen, C. Krellner, C. Geibel, F. Steglich, "Thermal transport properties of the heavy-fermion compound YbRh<sub>2</sub>(Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>)<sub>2</sub>", *Physica B* 378-80, 70 (2006).

**AG S. Schlecht (FU Berlin)**

- C. Erk, A. Berger, J.H. Wendorff, S. Schlecht, "Polymer-assisted preparation of nanoscale films of thermoelectric PbSe and PbTe and of lead chalcogenide polymer composite films", *Inorg. Chem.*, eingereicht.
- S. Schlecht, C. Erk, M. Yosef, "Nanoscale Zinc Antimonides: Synthesis and Phase Stability", *Inorg. Chem.* 45, 1693 (2006).
- M. Yosef, C. Erk, S. Schlecht, "Nanoscale antimonite thermoelectrics: nc-Zn<sub>4</sub>Sb<sub>3</sub>, nc-ZnSb and nc-CoSb<sub>3</sub>", *Proceedings of the 6<sup>th</sup> ECT, Nancy, 2005.*

**AG R. Schmechel (U Duisburg)**

- R.K. Joshi, F.E.Kruis, "Influence of Ag particle size on ethanol sensing of SnO<sub>1.8</sub>:Ag nanoparticle films: a method to develop ppb-level gas sensors", Appl. Phys. Lett. 89, 153116 (2006).
- R. Schmechel, "Hopping transport in doped organic semiconductors: A theoretical approach and its application to p-doped zinc-phthalocyanine", J. Appl. Phys. 93, 4653 (2003).
- F.E. Kruis, K. Nielsch, H. Fissan, B. Rellinghaus and E.F. Wassermann, "Preparation of size-classified PbS nanoparticles in the gas phase", Appl. Phys. Lett. 73, 547 (1998).

**AG J. Schmidt (Fhl Dresden)**

- D.G. Ebling, A. Jacquot, J. König, H. Böttner, U. Kühn, J. Schmidt, "Melt spinning preparation of Bismuth Telluride partially alloyed with IV-VI compounds for thermoelectric application", Proc. ICT 2007, Jeju Island, Korea, O-E-2.
- D.G. Ebling, A. Jacquot, J. König, H. Böttner, J. Schmidt, P. Spies, "Spark plasma sintered bismuth telluride for the fabrication of thermoelectric device", Proc. ICT 2007, Jeju Island, Korea, O-D-6.

**AGs O.M. Schmidt, J. Schumann (IFW Dresden)**

- S. Chakraborty, C. A. Kleint, A. Heinrich, C. M. Schneider, J. Schumann, M. Falke and S. Teichert, "Thermal conductivity in strain symmetrized Si/Ge superlattices on Si(111)", Appl. Phys. Lett. 83, 4184 (2003).
- V. Sauchuk, A. Boulouz, S. Chakraborty, J. Schumann, and H. Vinzelberg, "Transport and structural properties of binary skutterudite CoSb<sub>3</sub> thin films grown by dc magnetron sputtering technique", J. Appl. Phys. 92, 5319 (2002).
- A. Boulouz, S. Chakraborty, A. Giani, F. PascalDelannoy, A. Boyer, and J. Schumann, "Transport properties of V-VI semiconducting thermoelectric BiSbTe alloy thin films and their application to micromodule Peltier devices", J. Appl. Phys. 89, 5009 (2001).

**AG W. Seifert (U Halle)**

- W. Seifert, "Compatibility factor for the power output of a thermogenerator", phys. stat. sol. (a) Rapid Research Letters, 2007 (submitted).
- E. Müller, S. Walczak, W. Seifert, "Optimization Strategies for Segmented Peltier Coolers", phys. stat. sol. (a) 203, 2128 (2006).

**AG M. Stordeur (U Halle)**

- M. Stordeur and G. Willers, "Thermoelectric Films – Potential for new miniaturized Devices", Proc. 2nd Europ. Conf. on Thermoelectrics, Krakow, Poland, 15–17 Sept. 2004, 12 ps.
- I. Stark and M. Stordeur, "New Micro thermoelectric Devices Based on Bismuth Telluride-Type Thin Solids Films", Proc. 18th ICT '99, Baltimore, MD, 465 (1999).

**AG R. Ulbrich (U Göttingen)**

- K. J. Engel, M. Wenderoth, N. Quaas, T. C. G. Reusch, K. Sauthoff, R. G. Ulbrich, "Thermovoltage mapping of standing electron waves on Au(111) surfaces at low temperatures", Phys. Rev. B 63, 165402 (2001).
- A. Schneider, M. Wenderoth, K. J. Engel, M. A. Rosentreter, A. J. Heinrich, R. G. Ulbrich, "Local electronic structure at steps on Au(111) investigated by the thermovoltage in scanning tunneling microscopy", Appl. Phys. A 66, S161 (1998).

**AG F. Völklein (FH Wiesbaden)**

- J. Schumann, C.A. Kleint, H. Vinzelberg, J. Thomas, M. Hecker, J. Nurnus, H. Böttner, A. Lambrecht, C. Künzel, F. Völklein, "Micromachined thermoelectric test device based on Silicon / Germanium superlattices: Simulation, preparation and characterization of thermoelectric behaviour", 22nd Intern. Conf. Thermo-electrics, La Grande-Motte, 2003, Proc. IEEE Cat. No. 03TH8726 , 677-681 (2003).

**AG C. A. Volkert (U Göttingen)**

- H. Rösner, S. Parida, D. Kramer, C. A. Volkert, J. Weissmüller, "Reconstructing a nanoporous metal in three dimensions: An electron tomography study of dealloyed

gold leaf", Adv. Eng. Mat. 9, 535 (2007).

- Y. B. Park, R. Monig, C. A. Volkert, "Frequency effect on thermal fatigue damage in Cu interconnects", Thin Solid Films 515, 3253 (2007).

- C. A. Volkert, E. T. Lilleodden, D. Kramer, J. Weissmüller, "Approaching the theoretical strength in nanoporous Au", Appl. Phys. Lett. 89, 061920 (2006).

**AG F. von Oppen (FU Berlin)**

- J. Koch, F. von Oppen, Y. Oreg, and E. Sela, "Thermopower of Single-Molecule Devices", Phys. Rev. B 70, 195107 (2004).

**AG A. Waag (TU Braunschweig)**

- A. Waag, F. Fischer, K. Schull, T. Baron, H. J. Lugauer, T. Litz, U. Zehnder, W. Ossau, T. Gerhard, M. Keim, G. Reuscher, G. Landwehr, "Laser diodes based on beryllium-chalcogenides", Appl. Phys. Lett. 70, 280 (1997).
- A. Waag, H. Heinke, S. Scholl, C. R. Becker, G. Landwehr, "Growth of MgTe and Cd<sub>1-x</sub>Mg<sub>x</sub>Te Thin-Films by Molecular-Beam Epitaxy", J. Cryst. Growth 131, 607 (1993).
- T. Gruber, C. Kirchner, R. Kling, F. Reuss F, A. Waag, "ZnMgO epilayers and ZnO-ZnMgO quantum wells for optoelectronic applications in the blue and UV spectral region", Appl. Phys. Lett. 84, 5359 (2004).

**AG H. Weller (U Hamburg)**

- M. Pientka, V. Dyakonov, D. Meissner, A. Rogach, D. Vanderzande, H. Weller, L. Lutsen, D. Vanderzande, "Photoinduced charge transfer in composites of conjugated polymers and semiconductor nanocrystals" Nanotechnology 15,163 (2004).
- H. Weller, "Quantized semiconductor particles - a novel state of matter for materials science", Adv. Mat. 5, 88 (1993).
- A. Ennaoui, S. Fiechter, H. Tributsch, M. Giersig, R. Vogel, H. Weller, "Photoelectrochemical energy-conversion obtained with ultrathin organo-metallic-chemical-vapor-deposition layer of FeS<sub>2</sub> (Pyrite) on TiO<sub>2</sub>", J. Electrochem. Soc. 139, 2514 (1992).

**AG U. Woggon (Dortmund)**

- S. Tavenner-Kruger, Y. S. Park, M. Loneragan, U. Woggon, H. L. Wang, "Zero-phonon linewidth in CdSe/ZnS core/shell nanorods", Nano Lett. 6, 2154 (2006).
- F. Gindele, U. Woggon, W. Langbein, J. M. Hvam, K. Leonardi, D. Hommel, H. Selke, "Excitons, biexcitons, and phonons in ultrathin CdSe/ZnSe quantum structures", Phys. Rev. B 60, 8773 (1999).

**AG P. Woias (U Freiburg)**

- N. Kockmann, T. Huesgen, P. Woias, "Microstructured in-plane thermoelectric generators with optimized heat path", Transducers '07, Lyon, France, June 10-14, 2007, Digest of Technical Papers, Vol. 1, 133-136.

**AG M. Zacharias (U Freiburg)**

- H. J. Fan, M. Knez, R. Scholz, D. Hesse, K. Nielsch, M. Zacharias, U. Gösele, "Influence of surface diffusion on the formation of hollow nanostructures induced by the Kirkendall effect: The basic concept", Nano Lett. 7, 993 (2007).
- D. S. Kim, R. Ji, H. J. Fan, F. Bertram, R. Scholz, A. Dadgar, K. Nielsch, A. Krost, J. Christen, U. Gösele, M. Zacharias, "Laser-interference lithography tailored for highly symmetrically arranged ZnO nanowire arrays", Small 3, 76 (2007).
- H. J. Fan M. Knez, R. Scholz, K. Nielsch, E. Pippel, D. Hesse, M. Zacharias, U. Gösele, "Monocrystalline spinel nanotube fabrication based on the Kirkendall effect", Nature Materials 5, 627 (2006).

**AG P. Ziemann (U Ulm)**

- Th. Siebold and P. Ziemann, "Temperature dependence of the thermoelectric effect of ion-bombarded NbN films: Evidence for the suppression of phonon drag and renormalization", Phys. Rev. B 51, 6328 (1995).
- J. Xu, B. Koslowski, R. Möller, K. Läger, K. Dransfeld, I. H. Wilson, "Proposal to study the thermopower produced by a vacuum-tunneling junction", J. Vac. Sci. Technol. B 12, 2156 (1994).