

## Pressemitteilung

Institute of Science and Technology Austria

Florian Schleederer

10.03.2023

<http://idw-online.de/de/news810641>

Wissenschaftliche Publikationen  
Chemie, Physik / Astronomie  
überregional



## Die Topologie rotierender Moleküle

**Die seltsamen topologischen Eigenschaften einiger Formen von Materie werden seit Jahrzehnten erforscht. Nun haben Forscher des Institute of Science and Technology Austria (ISTA) topologische Eigenschaften zweiatomiger Moleküle entdeckt. Dabei wendeten sie ähnliche mathematische Methoden an wie bei Festkörpersystemen und verbinden damit zwei verschiedene Bereiche der Physik. Ihre Erkenntnisse versprechen mögliche zukünftige Anwendungen in der Chemie.**

Manchmal ergeben sich unvorhergesehene Verbindungen zwischen unterschiedlichen Forschungsgebieten in der Physik. Genau das ist der Fall bei den topologischen Eigenschaften von Quantenzuständen in rotierenden Molekülen. In einer neuen Studie haben PhD-Student Volker Karle, Postdoc Areg Ghazaryan und Professor Mikhail Lemeshko vom Institute of Science and Technology Austria (ISTA) nun gezeigt, dass ein einfaches rotierendes Molekül aus nur zwei Atomen Quantenzustände mit topologischen Eigenschaften aufweisen kann. Diese ähneln denen in Graphen und anderen topologischen Festkörpermateriale.

„Das Interessante ist, dass diese beiden Systeme – ein einzelnes rotierendes Molekül und eine Graphenschicht aus Millionen von Kohlenstoffatomen – sehr unterschiedlich sind und dennoch einige ihrer Eigenschaften durch ähnliche Mathematik beschrieben werden können“, erklärt Karle. „Wir verbinden damit die physikalische Chemie und Festkörperphysik.“ Die drei Forscher haben ihre neuen Erkenntnisse in Physical Review Letters veröffentlicht.

Doughnut bleibt Doughnut

„Topologie ist die Lehre der geometrischen Eigenschaften eines Objekts, die sich durch kontinuierliche Veränderung seiner Form und Größe nicht ändern. Die Erkenntnis, dass man Quantenzustände nicht nur nach ihrer Energie und Symmetrie, sondern auch nach ihrer Topologie klassifizieren kann, hat in den letzten Jahrzehnten zu einem echten Durchbruch in unserem Verständnis der Festkörperphysik geführt“, erklärt Lemeshko.

„Ein einfaches Beispiel für topologische Eigenschaften wäre ein Doughnut. Aus mathematischer Sicht ist ein Doughnut einfach ein Ring mit einem Loch“, fügt Karle hinzu. „Egal, wie man ihn dehnt oder zusammendrückt, er bleibt ein Doughnut, solange man das Loch nicht stopft oder eins hinzufügt. Die Doughnut Eigenschaft, ist daher topologisch vor 'kleinen' Störungen wie der Änderung seiner Form oder Größe geschützt.“

In Systemen wie topologischen Isolatoren entstehen diese topologischen Effekte durch Millionen von Atomen, die miteinander wechselwirken. Karle, Ghazaryan und Lemeshko haben jedoch gezeigt, dass dieses Phänomen auch in viel einfacheren Systemen wie einem einzelnen Molekül zu finden ist.

Ein Molekül mit Laserlicht anstoßen

„Das System, das wir untersuchen, ist ein einzelnes Molekül, das aus zwei aneinander gebundenen Atomen besteht“, sagt Karle. Die Forscher haben ein Modell entwickelt, das beschreibt, was in einem solchen Molekül passiert, wenn es durch kurze Laserpulse dazu gebracht wird, sich um den Mittelpunkt zwischen den beiden Atomen zu drehen. „Mit der richtigen Wellenlänge und dem richtigen Timing der Laserpulse können wir topologisch nichttriviale Quantenzustände im Molekül erzeugen, die sich ähnlich wie in Festkörpersystemen verhalten.“

Seit Jahrzehnten untersuchen Wissenschaftler:innen die topologischen Eigenschaften vieler verschiedener Materialien und Systeme. 2016 führte dies sogar zu einem Nobelpreis. Sie in einem einfachen Molekül zu finden, ermöglicht jedoch neue Arten von Experimenten und Anwendungen. „Wir stellen uns ein Experiment vor, bei dem ein Strom solcher Moleküle aus einer Quelle herausgeschossen und dann von Laserpulsen getroffen wird“, erhofft sich Karle. „Sie fliegen dann in einen Detektor, wo wir ihre Quantenzustände viel detaillierter untersuchen können, als dies mit Festkörpersystemen möglich ist.“ Von künftigen Experimenten erhoffen sich die Forscher noch viele weitere Erkenntnisse, die vielleicht den Grundstein für neue Anwendungen in der Chemie legen könnten.

#### Reaktionen kontrollieren

Nichttriviale topologische Eigenschaften, wie sie in dieser neuen Veröffentlichung beschrieben werden, könnten zu topologisch geschützten Quantenzuständen führen. Diese sind besonders interessant für alle Anwendungen, die gegen äußere Störungen wie Hitze, Magnetfelder oder Materialverunreinigungen resistent sein müssen. Ein bekanntes Beispiel, das in den letzten Jahren viel Forschungsinteresse geweckt hat, sind Quantencomputer, die auf topologischen Quantenbits basieren.

Die Moleküle, die Karle und seine Kollegen untersuchen, würden jedoch in anderen Bereichen Anwendung finden. „Wir hoffen, dass diese Forschung es uns ermöglicht, viele chemische Reaktionen besser zu verstehen. Damit könnten wir sie auch besser steuern“, sagt Lemeshko. „Wir könnten Laser einsetzen, um topologisch geschützte Quantenzustände in Molekülen zu erzeugen, die ihre Reaktionsfähigkeit mit anderen Chemikalien je nach Bedarf erhöhen oder verringern. Der topologische Schutz würde den Quantenzustand des Moleküls stabilisieren, der sonst schnell verschwinden würde.“

\*\*\*

#### Projektförderung

Das Projekt wurde mit Mitteln des Europäischen Forschungsrats (ERC) Starting Grant Nr. 801770 (ANGULON) finanziert.

#### Über ISTA

Das Institute of Science and Technology Austria (ISTA) ist ein Forschungsinstitut mit eigenem Promotionsrecht. Es beschäftigt Professor:innen nach einem Tenure-Track-Modell, Post-Doktorand:innen und PhD-Student:innen. Die Graduate School des ISTA bietet hochqualifizierten Student:innen mit einem Bachelor- oder Masterabschluss in Biologie, Mathematik, Informatik, Physik, Chemie und verwandten Bereichen voll finanzierte Doktoratsstellen. Neben dem Bekenntnis zum Prinzip der Grundlagenforschung, die rein durch wissenschaftliche Neugier getrieben wird, setzt ISTA darauf, wissenschaftliche Erkenntnisse durch technologischen Transfer und Wissensvermittlung in die Gesellschaft zu tragen. Der aktuelle Präsident ist Martin Hetzer, ein renommierter Molekularbiologe und vormals Senior Vice President am The Salk Institute for Biological Studies in Kalifornien, USA.  
[www.ista.ac.at](http://www.ista.ac.at)

wissenschaftliche Ansprechpartner:

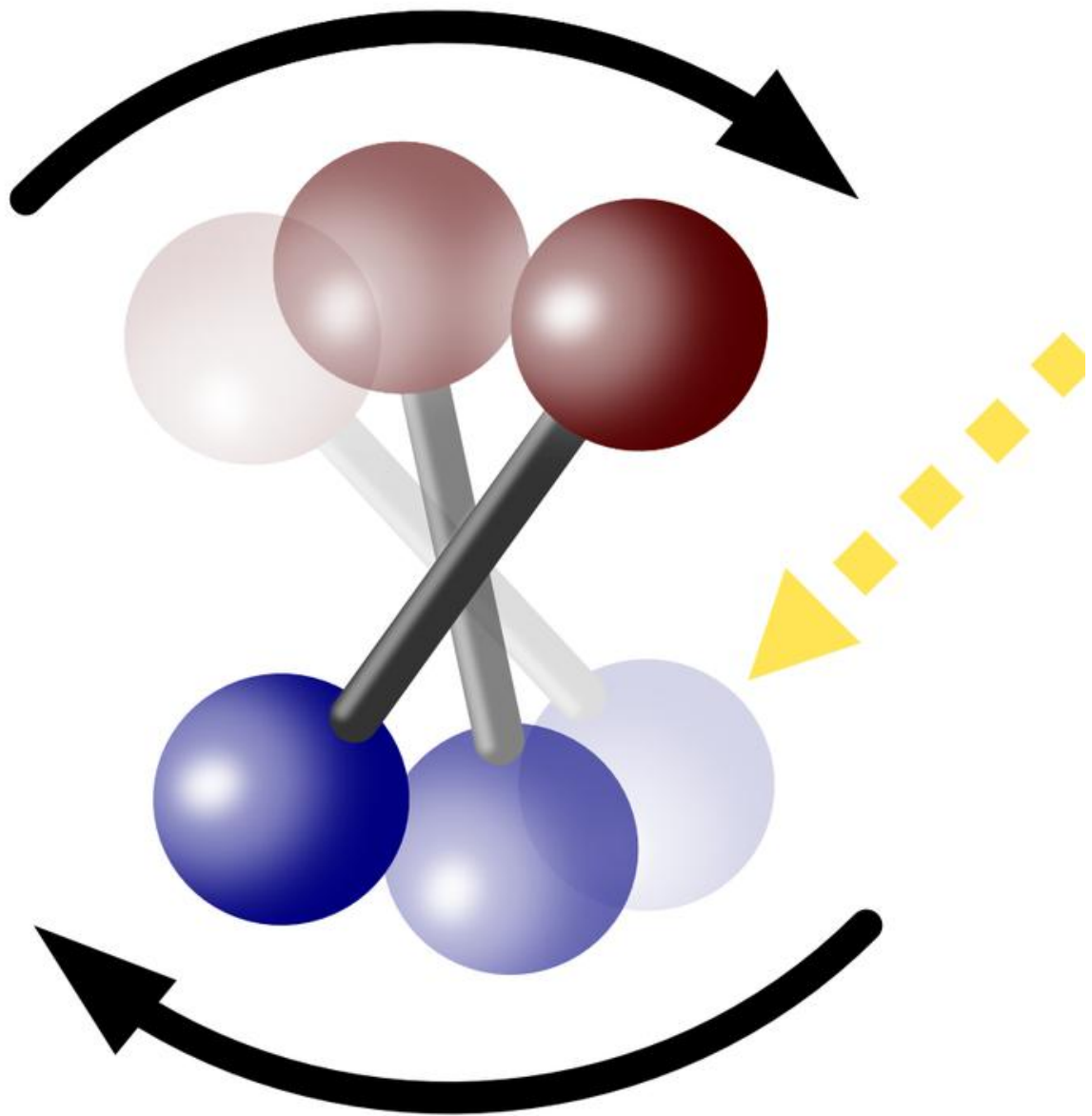
Florian Schlederer  
Florian.Schlederer@ista.ac.at  
+43 664 8832 6174

Originalpublikation:

V. Karle, A. Ghazaryan, and M. Lemeshko. 2023. Topological charges of periodically kicked molecules. Physical Review Letters.

URL zur Pressemitteilung: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.130.103202>

Anhang Ein Doughnut unter verschiedenen geometrischen Transformationen. Aus mathematischer Sicht bleibt der Doughnut ein Doughnut, solange er nur ein Loch hat – egal wie sehr er verformt wird.  
<http://idw-online.de/de/attachment98052>



Rotierendes zweiatomiges Molekül. Ein aus zwei Atomen bestehendes Molekül wird von Laserlicht (gelb) getroffen, die es um den Mittelpunkt seiner Bindung rotieren lassen.  
ISTA



PhD-Student Volker Karle, Postdoc Areg Ghazaryan und Professor Mikhail Lemeshko.  
ISTA

Volker Karle, Areg Ghazaryan, Nadine Poncioni