

Press release**Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe****Dipl.-Übers. Ingrid Rothe**

03/30/2022

<http://idw-online.de/en/news791178>Research results, Scientific Publications
Chemistry, Physics / astronomy
transregional, national**Wenn ein Band flach wird: Auf der Suche nach Flachheit in Materialien**

Die weltweit erste Datenbank von Flachbandmaterialien, die diese Woche in der Fachzeitschrift Nature veröffentlicht wurde, könnte die Suche nach neuen Materialien mit exotischen Quanteneigenschaften wie Magnetismus und Supraleitung erleichtern, die in Speichergeräten oder bei der verlustfreien Energieübertragung über große Entfernungen eingesetzt werden können.

Die richtigen Zutaten zu finden, um Materialien mit exotischen Quanteneigenschaften zu schaffen, war für experimentelle Wissenschaftler eine Herausforderung, da es unendlich viele mögliche Kombinationen verschiedener Elemente gibt, die synthetisiert werden müssen.

Dank einer internationalen Zusammenarbeit unter der Leitung von Andrei Bernevig, Ikerbasque-Gastprofessor am Donostia International Physics Center (DIPC) und Professor an der Princeton University, und Nicolas Regnault von der Princeton University und der Ecole Normale Supérieure Paris, CNRS, sowie unter Beteiligung von Luis Elcoro von der Universität des Baskenlandes (UPV/EHU) und der beiden Max Planck Institute Mikrostrukturphysik und Chemische Physik fester Stoffe könnte die Entwicklung solcher Materialien von nun an gezielter erfolgen.

Das Team führte eine systematische Suche nach potenziellen Kandidaten in einem riesigen Heuhaufen von 55.000 Materialien durch. Der Eliminierungsprozess begann mit der Identifizierung der sogenannten Flachbandmaterialien, d. h. elektronischer Zustände mit konstanter kinetischer Energie. In einem flachen Band wird das Verhalten der Elektronen hauptsächlich durch die Wechselwirkungen mit anderen Elektronen bestimmt. Die Forscher erkannten jedoch, dass Flachheit nicht die einzige Voraussetzung ist, denn wenn die Elektronen zu eng an die Atome gebunden sind, können sie sich auch in einem flachen Band nicht bewegen und interessante Materiezustände erzeugen. "Man möchte, dass sich die Elektronen gegenseitig sehen können, was man erreichen kann, indem man dafür sorgt, dass sie sich im Raum ausdehnen. Das ist genau das, was topologische Bänder bieten", sagt Nicolas Regnault.

Die Topologie spielt in der modernen Physik der kondensierten Materie eine entscheidende Rolle, wie die drei Nobelpreise von 1985, 1997 und 2016 zeigen. Sie erzwingt die Erweiterung einiger Quantenwellenfunktionen und macht sie unempfindlich gegenüber lokalen Störungen wie Verunreinigungen. Dies könnte dazu führen, dass einige physikalische Eigenschaften, wie z. B. ein Widerstand, quantisiert werden oder die Materialien perfekt leitende Oberflächenzustände besitzen.

Glücklicherweise ist das Team führend bei der Charakterisierung der topologischen Eigenschaften von Bändern durch seinen Ansatz, der als "topologische Quantenchemie" bekannt ist, und verfügt damit über eine große Materialdatenbank sowie über die theoretischen Werkzeuge, um nach topologischen flachen Bändern zu suchen. Durch den Einsatz von Werkzeugen, die von analytischen Methoden bis hin zu Brute-Force-Suchen reichen, fand das Team alle derzeit in der Natur bekannten Flachbandmaterialien. Diese Datenbank von Flachbandmaterialien ist online verfügbar <https://www.topologicalquantumchemistry.fr/flatbands> mit einer eigenen Suchmaschine. "Die wissenschaftliche Gemeinschaft kann nun nach flachen topologischen Bändern in Materialien suchen. Wir haben von 55.000 Materialien etwa 700 gefunden, die potenziell interessante flache Bänder aufweisen", sagt Yuanfeng Xu von der Princeton University und dem Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik, einer der beiden Hauptautoren der Studie. "Wir haben sichergestellt, dass die von uns geförderten Materialien vielversprechende Kandidaten für die chemische Synthese sind", betont Leslie Schoop von der Chemieabteilung in Princeton. Das Team hat die topologischen Eigenschaften dieser Bänder weiter klassifiziert und herausgefunden, welche Art von delokalisierten Elektronen sie beherbergen.

Nach Fertigstellung dieser umfangreichen Datenbank wird das Team nun damit beginnen, die vorhergesagten Materialien zu züchten, um die potenziell unzähligen neuen Wechselwirkungszustände experimentell zu entdecken. "Jetzt, da wir wissen, wo wir suchen müssen, müssen wir diese Materialien als Einkristalle herstellen", sagt Claudia Felser vom Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe. "Wir haben ein Dream-Team von Experimentatoren, die mit uns zusammenarbeiten. Sie sind begierig darauf, die physikalischen Eigenschaften dieser Kandidaten zu messen und zu sehen, welche aufregenden Quantenphänomene sich zeigen werden."

Die Datenbank der Flachbandmaterialien, die am 30. März 2022 in Nature veröffentlicht wurde, ist das Ergebnis jahrelanger Forschung des Teams. "Viele Leute und viele Förderinstitutionen und Universitäten, denen wir das Projekt vorstellten, sagten, dies sei zu schwierig und könne niemals verwirklicht werden. Es hat uns einige Jahre gekostet, aber wir haben es geschafft", so Andrei Bernevig.

Die Veröffentlichung dieser Datenbank wird nicht nur die Zufälligkeit bei der Suche nach neuen Materialien verringern, sondern auch eine umfangreiche Suche nach Verbindungen mit exotischen Eigenschaften wie Magnetismus und Supraleitfähigkeit ermöglichen, die in Speichergeräten oder bei der verlustfreien Energieübertragung über große Entfernungen eingesetzt werden können.

Finanziert wurde das Projekt hauptsächlich durch einen Advanced Grant des Europäischen Forschungsrats (ERC) am DIPC (SUPERFLAT, ERC-2020-ADG).

Abbildung: Eine künstlerische Darstellung der Banddispersionen für ein bestimmtes Material. Die schwarzen Bänder stellen die verschiedenen Bänder dar, während die vertikale Achse die kinetische Energie angibt. In der Mitte befinden sich zwei flache Bänder, die auf die einzigartige geometrische Struktur des Materials zurückzuführen sind.

contact for scientific information:

Claudia.Felser@cpfs.mpg.de

Original publication:

Nature: <https://www.nature.com/articles/s41586-022-04519-1>

DOI: 10.1038/s41586-022-04519-1



Eine künstlerische Darstellung der Banddispersionen für ein bestimmtes Material (s. letzter Absatz).
© MPI CPFS