

# **Frustration und Tanzflächen: Entwicklung von Nanokonzepten anhand der Quantenmechanik**

Samir Lounis

Institut für Festkörperforschung, Forschungszentrum Jülich, 52425 Jülich

Vielleicht sind Sie ein Science-Fiction-Fan und vielleicht haben Sie den Film "I, Robot" gesehen, in dem Will Smith die Menschheit mit Hilfe von "Naniten" rettete, die den bösen Hauptcomputer von innen zerstörten. Naniten sind ein Beispiel für Maschinen, Nanobots oder Nanorobotern, von denen unser Jahrhundert träumt. Sie sind nur ein paar Nanometer groß oder in anderen Worten: 80000 Mal kleiner als der Durchmesser eines menschlichen Haares. Vor zwei Jahrhunderten schrieb Jules Verne über die Raumfahrt, Flugreisen und U-Bootfahrten bevor lenkbare Flugzeuge und praxistaugliche U-Boote entwickelt und bevor Mittel und Wege gefunden wurden, um ins Weltraum zu fliegen. Viele dieser Vorhersagen wurden Realität und andere nicht. Daher ist die Frage gerechtfertigt, ob Naniten Wirklichkeit werden oder nicht und welche der heutigen Science-Fiction-Ideen überleben werden?

Bevor Science-Fiction auf die Realität oder industrielle Anwendungen übertragen werden kann, ist zunächst ein Verständnis der Wechselwirkungen auf Nano-Ebene erforderlich. Das ist eines der vielen Ziele des IFF (Forschungszentrum Jülich), die zu den beiden in diesem Manuskript vorgestellten neuartigen Konzepten führen: Nanodominos und Nanosonare. Diese sind die Ergebnisse von Computersimulationen [1, 2, 3], die zeigen, wie die intrinsischen Eigenschaften von Elektronen, wie etwa ihr kleiner Magnet und dessen Verbreitung in einem Material, genutzt werden kann, um Nanogeräte für Datenspeicherung, Informationsübertragung von einem Punkt zum anderen, Absuchen von Oberflächen und Kartenzeichnungen von tiefer liegenden verborgenen Objekten zu entwickeln. Ein Nanit wird all diese Möglichkeiten brauchen, um z.B. im Blutstrom zu schwimmen, Arterien zu reinigen während menschliche Krebszellen abgeschossen werden. Tatsächlich müsste er logische Operationen durchführen und überall hinschauen können. Nanodominos und Nanosonare sind sehr attraktive Konzepte nicht nur aufgrund ihrer einfachen Anwendbarkeit durch derzeitige verfügbare Versuchsmethoden, sondern auch für Konzepte im Hinblick auf Naniten.

## **Nanodomino:**

Die Speicherung von immer größeren Datenmengen auf immer kleinerem Raum und die Durchführung von logischen Operationen durch immer kleinere Energiemengen sind zwei der Voraussetzungen für weitere Fortschritte in der Informationstechnologie. Dies erfordert die Untersuchung des magnetischen Verhaltens auf atomarer Ebene. Aufgrund der intrinsischen Eigenschaft des Elektrons einen Minimagneten in sich zu tragen, erzeugen sie ein magnetisches Moment in Atomen, in dem sie als kollektive Einheit zusammen arbeiten. Überraschenderweise haben wir in Jülich bei der Betrachtung von magnetischen Momenten in Reihen aus einzelnen Mangan-Atomen auf einer Nickeloberfläche, so genannten Nanodrähten, eine Art Domino-Effekt entdeckt. Wir fanden heraus, dass sich die magnetische Konfiguration dieser Nanodrähte in Abhängigkeit von ihrer Länge unterscheidet - und dabei gibt ein Atom den

Ausschlag! Erstaunlicherweise bewirkt nur ein Atom mehr oder weniger einen drastischen Unterschied. Wenn die Zahl der Atome ungerade ist, richten sich die magnetischen Momente antiparallel aus, bei gerader Anzahl nehmen sie eine gekippte Kompromissposition zwischen parallel und antiparallel ein. Fügt man also an einem Ende des Nanodrahtes ein Atom hinzu oder entfernt eines, ändert man gleichzeitig die magnetische Konfiguration des gesamten Drahtes. Wie bei einer Reihe Dominosteine kippen die magnetischen Momente um. Hier endet aber auch die Analogie, denn der Effekt ist im Gegensatz zu umfallenden Dominosteinen vollkommen reversibel. Dieses Verhalten ist ein reiner Nanoeffekt, der bei Vollmaterialien nicht beobachtet werden kann.

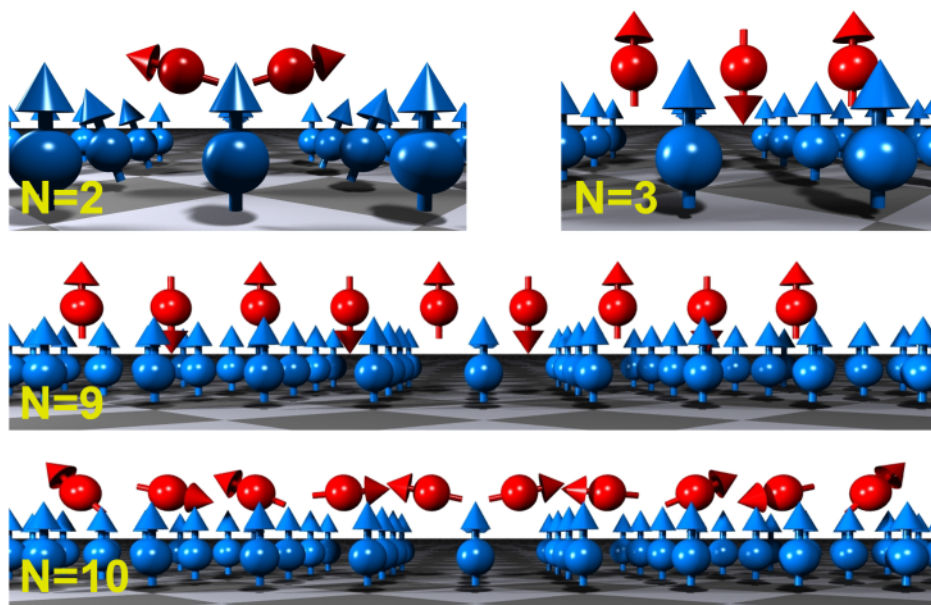
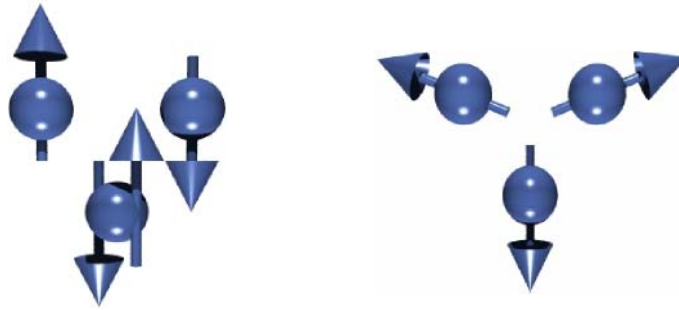


Abbildung 1: Die magnetischen Momente einer Reihe von Manganatomen (rot) richten sich antiparallel auf einer Nickeloberfläche aus (blau), wenn ihre Zahl  $N$  ungerade ist, wie z.B. 3 oder 9. Wenn ihre Zahl gerade ist, etwa 2 oder 10, kippen die magnetischen Momente in eine Kompromissstellung.

Welche Physik liegt hinter diesen Nanodominos? Angenommen es gibt zwei Eisenatome, deren Abstand zueinander einen Viertel Nanometer beträgt. Diese möchten, dass ihre magnetischen Momente in die gleiche Richtung zeigen und parallel zueinander stehen. Dies wird ferromagnetische Kopplung genannt. Auf der anderen Seite möchten zwei Manganatome, dass ihre Momente parallel zueinander stehen, jedoch sollen sie in entgegengesetzte Richtungen zeigen. Dies wird antiferromagnetische Kopplung genannt. Diese verschiedenen bevorzugten Kopplungen werden durch die Anzahl der Elektronen in jedem Atom bestimmt. Was passiert, wenn ein zusätzliches Manganatom in eine abstandsgleiche Position zu den beiden vorhergehenden Atomen gebracht wird (Abbildung 2)? Das magnetische Moment des dritten Atoms weiß nicht, was es tun soll! Entweder koppelt es sich antiferromagnetisch an ein Manganatom und macht das andere unglücklich oder es wechselt seine magnetische Ausrichtung, um das zweite Manganatom glücklich zu machen, was das erste Atom nicht gut finden würde. Diese Situation wird magnetische Frustration genannt und kann häufig in der Natur beobachtet werden. Die Folge ist schließlich, dass die magnetischen Momente so

rotieren, dass ein Kompromiss gefunden wird. In diesem Falle wird die Frustration durch einen Rotationswinkel von 120 Grad zwischen den magnetischen Momenten beseitigt.



*Abbildung 2: Beispiel einer magnetischen Frustration dargestellt mit antiferromagnetischen Manganatomen. Frustration tritt auf, wenn sich alle drei Atome antiferromagnetisch koppeln wollen (links), was zu einem nichtkollinearen magnetischen Zustand führt.*

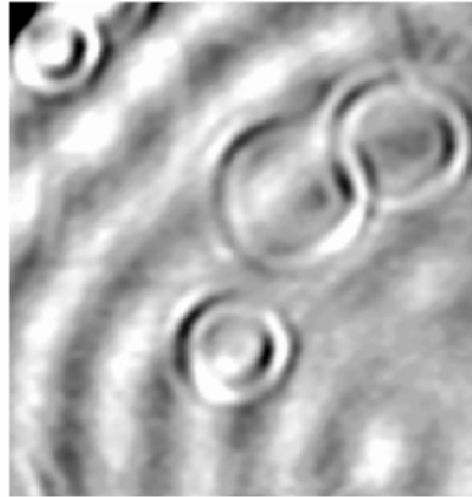
Stellen Sie sich vor, das dritte Manganatom würde durch eine ferromagnetische Nickeloberfläche ersetzt werden. Simulationen zeigen, dass sich ein einziges Manganatom gerne parallel zu den Nickelatomen koppelt. Aus diesem Grund findet Frustration statt, da sich beide Manganatome ebenfalls antiferromagnetisch zueinander koppeln wollen. Der Kompromiss besteht darin, dass sich die Manganmomente antiparallel zueinander und grob senkrecht zu den Substratmomenten ausrichten (Abbildung 1 für  $N=2$ ). Eine zusätzliche magnetische Wechselwirkung durch ein mögliches drittes sehr nah zum vorhergehenden Paar angeordneten Manganatoms zerstört die Frustration und stabilisiert das reine antiparallele Verhalten. Dies führt zu dem geraden-ungeraden Effekt für die längeren Drähte. Drähte mit einer geraden Anzahl von Atomen sind frustriert und haben deshalb eine gefährdete magnetische Konfiguration, während ungerade Drähte nicht frustriert sind und ein antiparalleles magnetisches Verhalten aufweisen. Am Ende konnten wir ein außerordentlich nichtlokales Phänomen beobachten. Wenn etwas am Ende eines langen Drahtes verändert wird, verändert sich die Eigenschaft der gesamten Kette.

Durch diesen magnetischen Effekt sind magnetische Schalter und logische Elemente auf atomarer Ebene vorstellbar. Da die Informationen auf einer Festplatte binär in Form von 0 und 1 gespeichert werden, könnten die gekippten Dominos für das Bit 0 stehen und die nicht gekippten für das Bit 1. Daher können die Dominokaskaden für den Transport von einzelnen Informationsbits von einem Ort zum anderen genutzt werden. Sie können in Strukturen angeordnet werden, die logische Operationen durchführen. Solch ein Gerät wäre für die künstlichen Gehirne der Naniten von Bedeutung.

Nachdem dargestellt wurde, wie die Minimagnete der Elektronen für die Entwicklung eines Nanodominos genutzt werden können, widmet sich der nächste Abschnitt den Wegen, die Elektronen einschlagen, wenn sie sich in einem Material bewegen und der möglichen Anwendung in einem Nanosonar-Konzept.

### **Nanosonar:**

Was passiert, wenn ein Stein in einen See geworfen wird? Das zusätzliche Volumen bewirkt Wellen oder Kräuselungen auf der Oberfläche (Abbildung 3, links). Der gleiche Effekt ist zu beobachten, wenn sich ein fremdes Atom unter einer Oberfläche verbirgt. Das Meer der anfänglich im Material vorhandenen Elektronen reagiert und versucht die zusätzlichen fremden Elektronen abzuschirmen, wodurch es zu Schwingungen kommt (Abbildung 3, rechts)



*Abbildung 3: Durch ein externes Objekt verursachte Kräuselungen auf der Wasseroberfläche (links) und Kräuselungen auf dem Elektronenmeer aufgrund von fremden Atomen, die sich hinter der Kupferoberfläche verbergen (rechts) [4].*

Diese Schwingungen können in einem Nanosonargerät genutzt werden, das z.B. die Entdeckung verborgener Objekte unter Oberflächen und die Untersuchung ihrer elektronischen und magnetischen Eigenschaften ermöglichen würde. Was bedeutet Sonar in unserem Makroleben? **Sonar** (für **S**ound **N**avigation und **R**anging) ist eine Technik, die Schallausbreitung (meist unter Wasser) nutzt, um zu navigieren, kommunizieren und andere Schiffe zu orten oder die Tiefen unter Wasser abzusuchen. Das Prinzip ist, dass eine Schallwelle abgegeben wird, die sich ausbreitet bis sie auf ein Objekt oder eine Oberfläche stößt und zurück reflektiert wird (Abbildung 4). Wenn die Zeit bekannt ist, die für eine Reflektion und die Schallgeschwindigkeit gebraucht wird, können wir die Entfernung zu einem Objekt unter Wasser bestimmen.

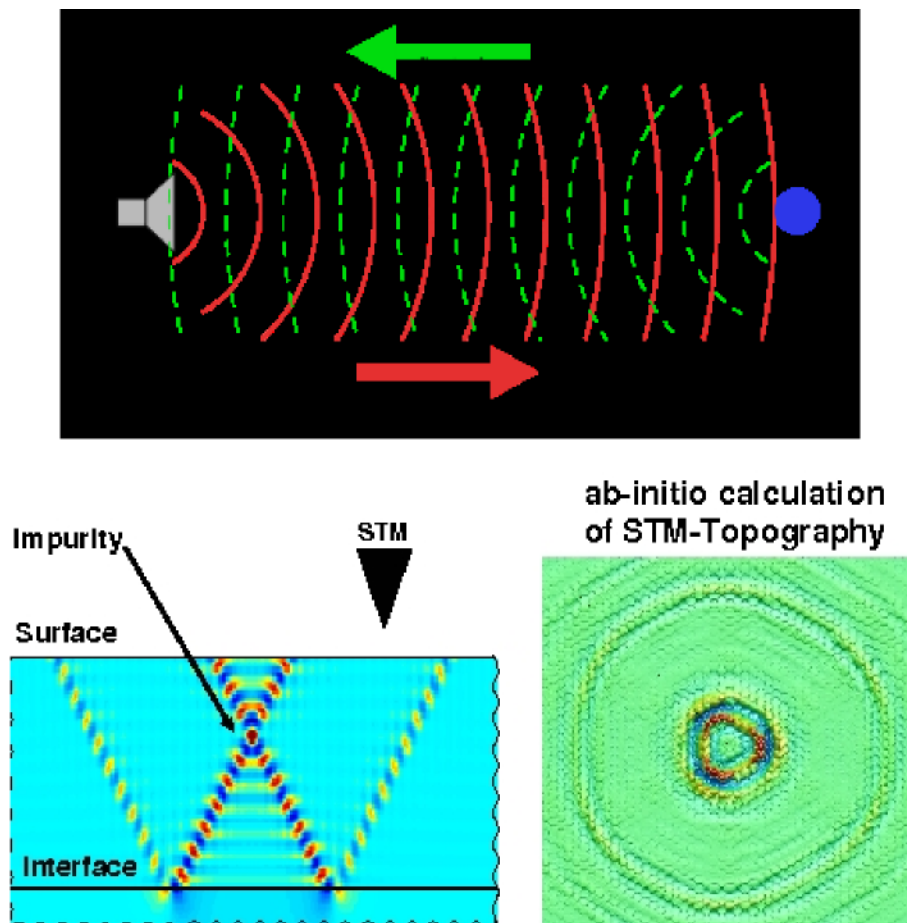


Abbildung 4: Obere Abbildung: Konzept eines Sonargeräts, bei dem abgegebene Wellen durch ein bestimmtes Objekt zurück reflektiert werden; untere Abbildungen: ein Nanosonargerät ist den Elektronenwellen sehr ähnlich, diese breiten sich anstelle des Schalls aus. Reflektion bei einer verborgenen Verschmutzung führt zu einem ersten Kreis, während die Reflektion an einer Grenzfläche zu einem weiteren zweiten Kreis führt. Das grünfarbige mit unseren Simulationen erhaltene Bild entspricht einer Oberfläche der Größe 100nm x 100nm.

Dieses Konzept ist exakt auf Nano-Ebene anwendbar, bei dem das hauptsächliche Tool das Rastertunnelmikroskop (RTM) ist, das Messungen der Elektronenverteilung auf Oberflächen ermöglicht. Beim Nanosonargerät werden die Schallwellen durch Elektronenwellen ersetzt. Immer wenn die Elektronen auf ein fremdes Objekt treffen, werden sie reflektiert und auf der

Oberfläche durch das RTM sichtbar. Dies würde eigentlich die einzige uns bekannte mögliche Analogie zum Makrosonar darstellen. Wenn Elektronen in einem Festkörper in Bewegung sind, folgen sie tatsächlich keinen zufälligen Wegen. Sie folgen bestimmten Wegen, die durch die subatomare Umgebung geschaffen wurde. Diese Straßen können so groß wie Schnellstraßen aussehen mit Geschwindigkeiten wie auf der Autobahn oder man kann sie sich wie kleine Dorfstraßen mit niedrigen Geschwindigkeiten und einer Sperre am Ende vorstellen. Dies führt dazu, dass die Elektronen an einigen Stellen oder Richtungen auftauchen und an anderen wie Geister verschwinden.

Wenn die Straßen in alle Richtungen gleich wären, würden die auf der Oberfläche erkennbaren Elektronenkräuselungen zylindrisch sein, so wie die, die man bei einem Steinwurf in den See beobachten würde. Die linken Bilder in Abbildung 5 zeigen zwei Beispiele von Elektronenschwingungen, die auf zwei Oberflächen beobachtet wurden: Kupfer mit zwei besonderen Ausrichtungen, einer sogenannten (111)- und einer (100)-Ausrichtung. Auf beiden Oberflächen sind die Schwingungen lokalisiert, in einem Fall jedoch ähnelt die Form einem Dreieck und im anderen Fall sieht die Form eher wie ein Quadrat aus. Offensichtlich sind die von den Elektronen gefolgten Wege nicht in allen Richtungen gleich. Wie sind diese Straßen konstruiert? Die Antwort liegt in einer sehr wichtigen physikalischen Materialeigenschaft, die Fermi-Oberfläche genannt wird. In der Physik der kondensierten Materie ist dies ein abstraktes Konzept, das für die Vorhersage der thermischen, elektrischen, magnetischen und optischen Eigenschaften von Metallen, Halbmetallen und dotierten Halbleitern nützlich ist. Eigentlich ist ein Festkörper wie ein Schreibtisch mit vielen Schubladen. Jedes Elektron kann nur einen Energiezustand besetzen, wie eine Schublade in der sich exakt ein Elektron befindet, von der niedrigsten Energie angefangen. Die letzte Schublade, die der höchsten besetzten Energie entspricht, definiert die Fermi-Oberfläche. Die Form dieser Oberfläche wird von der Periodizität und Symmetrie des Kristallgitters abgeleitet. Wenn die Fermi-Oberfläche eine Kugel ist, sind die Straßen alle gleich, in Wirklichkeit aber haben ein Großteil der Kristalle Fermi-Oberflächen mit Formen, die von der einer Kugel abweichen. Was passiert dann mit den Elektronen, wenn sie sich in einem Festkörper bewegen? Auf ihrer Reise sehen sie Fermi-Oberflächen, die wie Tanzflächen aussehen. Auf einer Fläche voll mit Hindernissen wie Tischen, Stühlen, Säulen, die außerdem nicht flach ist, ist der Elektronentanz erschwert und die Elektronen werden dabei behindert, zur nächsten Tanzfläche zu kommen. Auf einer schönen flachen leeren Tanzfläche würden sie kohärent tanzen und vorwärts kommen. Durch die Nutzung des RTM können die Fußabdrücke ihres kohärenten Tanzes verfolgt werden.

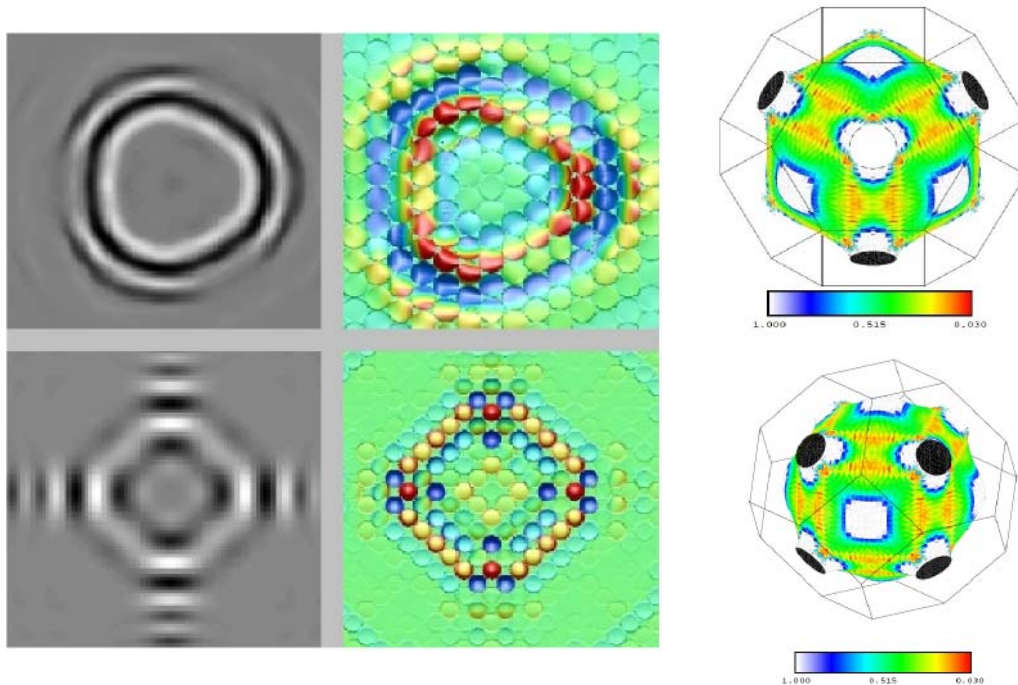


Abbildung 5: Elektronenwellen aufgrund von verborgenen Verschmutzungen unter der Kupfer(111)-Oberfläche (obere Abbildungen) und Kupfer(001)-Oberfläche (untere Abbildungen). Die Versuchsmessungen von Weismann und seinen Mitarbeitern (Universität Göttingen) auf der linken Seite werden mit Jülichs theoretischen Berechnungen in der Mitte anhand der Flächen von 3 nm x 3 nm verglichen. Die Fermi-Oberfläche (rechts) für Cu ist mit den zwei Richtungen 111 (oben) und 001 (unten) dargestellt. Die roten Farben stellen die sehr flachen Oberflächenbereiche dar und entsprechen dem, was auf der Oberfläche mittels des RTM gesehen wird.

Für Kupfer wird die Fermi-Oberfläche in Abbildung 5 (rechts) gezeigt, in der die flachen Bereiche rot dargestellt sind. Ihre Positionen und ihre Form entsprechen dem, was als Schwingungen auf Oberflächen entlang der zwei verschiedenen Richtungen gesehen wird.

Neben der Bestimmung von verborgenen Objekten können Nanosonargeräte daher auch dazu genutzt werden, um Informationen über Fermi-Oberflächen zu beschaffen, d.h. die Tanzflächen und die Straßen, die die Elektronen benutzen würden sowie andere physikalische Eigenschaften. Die magnetischen Eigenschaften der verborgenen Objekte können ebenfalls erfasst werden dank der verschiedenen Reflektionen der Elektronen, wenn sie auf eine magnetische Oberfläche treffen im Vergleich zu nichtmagnetischen Oberflächen. Dies ist so als würde ein Ball gegen eine Wand oder eine Matratze geworfen werden. Die Reflektion ist nicht die selbe.

### **Zusammenfassung:**

Nicht jede Idee von Jules Vernes wurde Realität! Futuristische Aufregung beiseite, es gibt diesen großen Traum von der Gestaltung der Welt, der Nanowelt, Atom für Atom, eine Welt voller neuer Phänomene, aber dieser Traum muss die Regeln der Quantenmechanik befolgen und muss zu den Fortschritten der Nanotechnologie passen, um jedem zur Verfügung stehen zu können. Oft ist Geduld erforderlich. Jülicher Wissenschaftler haben jedoch im Zuge ihrer Untersuchungen zur Frustration von magnetischen Wechselwirkungen, der Tanzflächen sowie Straßen der winzigen quantenmechanischen Welt der Elektronen, Atome und Moleküle zwei Konzepte entwickelt, die mit den derzeit verfügbaren Technologien realisierbar sind: Nanodominos und Nanosonare. Diese können als Gehirne und Augen von zukünftigen Naniten fungieren.

Danksagung: Ich möchte den Wissenschaftlern des IFF danken, die mir eine große Hilfe waren und mich in den verschiedenen Forschungsphasen meiner Dissertation sehr unterstützt haben: Dr. Ph. Mavropoulos, Dr. R. Zeller, Prof. P. H. Dederichs und Prof. S. Blügel.

- 1 Die Simulationen basieren auf der Dichtefunktionaltheorie, für die W. Kohn 1998 den Nobelpreis für Chemie erhielt.
- 2 Die Korringa-Kohn-Rostoker-Greensche Funktionsmethode ist ein in Jülich entwickeltes Simulationstool.

- 3 Theory of Magnetic Transition Metal Nanoclusters Deposited on Surfaces,  
Samir Lounis, Schriften des Forschungszentrum Jülich, 2007  
Collection Matter and Material, Volume 41, ISBN 978 -3-89336-501-2.
- 4 Messungen mittels Rastertunnel-Mikroskopie von A. Weismann, M. Wenderoth und R. G. Ulbrich der  
Universität Göttingen.