

Moleküle statt Atome: Magnetische Adsorbate auf Oberflächen für die molekulare Spintronik

Schritte zu einem chemischen Verständnis des Kondo-Effekts

Marc Philipp Bahlke, Carmen Herrmann, Institut für Anorganische und Angewandte Chemie, Universität Hamburg

Kurzgefasst

- Magnetische Moleküle auf Oberflächen können Vorteile haben für die effiziente Verarbeitung, Speicherung und den Transport von Information auf kleinster Skala im Rahmen der Spintronik.
- Ziel ist es, die Eigenschaften dieser Moleküle und ihre Wechselwirkung mit Oberflächen mithilfe der Elektronenstrukturtheorie so zu verstehen, dass verlässliche Vorhersagen / Simulationen ihres Verhaltens möglich sind.
- Dazu werden im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie und darauf aufbauender Ansätze die Kondo-Physik von Cobalt-Atomen auf Kupferoberflächen untersucht (auch in Hinblick auf ihre chemische Kontrollierbarkeit durch Koordination von Carbonyl-Liganden). Durch Variation des Metallatoms und der Oberfläche wird versucht, Beziehungen zwischen Struktur und Kondo-Physik herzustellen.

Ein wichtiger Grund dafür, warum das Mooresche Gesetz vor kurzem von der Industrie aufgegeben wurde [1] (und warum die Taktfrequenz von Prozessoren stagniert), ist die Wärme, die entsteht, wenn Elektronen durch einen sehr dünnen Draht fließen, und die bei sehr kleinen Bauteilen nicht mehr abgeleitet werden kann. Eine mögliche Lösung für dieses Problem wären Ketten von spinpolarisierten ("magnetischen") kleinsten Untereinheiten (zum Beispiel Atomen oder Moleküleinheiten), wobei die Ausrichtungen der magnetischen Momente der Untereinheiten so miteinander gekoppelt sind, dass die Umkehr des magnetischen Moments an einem Ende der Kette sich in einem dominoartigen Effekt entlang der Kette fortpflanzt. Da dabei keine Ladungen fließen, entsteht nur wenig Wärme, und trotzdem kommt die Information am anderen Ende der Kette an. Es konnte experimentell gezeigt werden, dass Ketten von Eisenatomen auf Metalloberflächen auf diese Art Information transportieren können [2]. Da Ketten aus einzelnen Atomen auf einer Oberfläche oft aufwendig "per Hand" im Rasterkraftmikroskop aufgebaut werden müssen, sind molekulare Ketten eine interessante Alternative, da sie sich prinzipiell wegen der kontrollierbareren Wechselwirkungen der Untereinheiten eigenständig anordnen können. Auch

hier wurde experimentell gezeigt, dass solche Ketten (auch mit Verzweigungen) prinzipiell hergestellt werden können [3,4] (siehe Abbildung 1).

Die theoretische Chemie kann auf diesem Gebiet einen wichtigen Beitrag leisten, indem sie Eigenschaften auf Grundlage von Simulationen vorhersagt, und indem sie experimentelle Phänomene anhand von chemischen Konzepten erklärt.

Spinpolarisierte Adsorbate auf metallischen Oberflächen können bei genügend tiefen Temperaturen den Kondo-Effekt zeigen, der sich in einem Anstieg des Leitwerts nahe einer Spannung von 0V äußert, und der von der Wechselwirkung des Adsorbats mit den Leitungselektronen des Substrats herrührt. Unser Ziel ist es, diesen Effekt für Adsorbate auf Oberflächen verstehen und vorhersagen zu können, und zwar vor allem dann, wenn das Adsorbat chemisch verändert wird. Es konnte zum Beispiel experimentell gezeigt werden, dass die Kondo-Temperatur steigt (also die maximale Temperatur, bis zu der dieser Effekt beobachtet werden kann), wenn an ein Cobaltatom auf einer Kupfer(001)-Oberfläche Carbonyl-Liganden angelagert werden (siehe Abbildung 2), und zwar je höher, je größer die Zahl der Liganden [5]. Wir modellieren dieses Verhalten mithilfe der Elektronenstrukturtheorie, und wollen den Anstieg der Kondo-Temperatur mithilfe von chemischen Konzepten (wie Molekülorbitalen und deren Wechselwirkungen) verstehen. Darauf aufbauend könnten dann Systeme vorgeschlagen werden, die besonders hohe oder niedrige Kondo-Temperaturen zeigen.

Wir können dabei auf Vorrarbeiten aus dem Projekt hhc00015, "Verständnis und Kontrolle der Kommunikation in komplexen nanoskopischen Systemen", zurückgreifen.

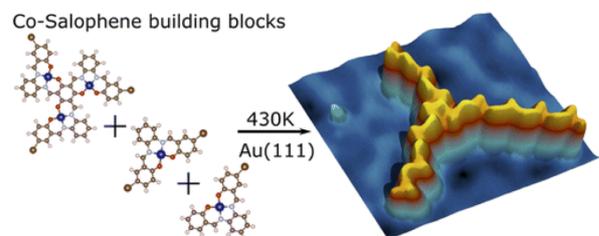


Abbildung 1: Selbstorganisierte Ketten spinpolarisierter Moleküle auf einer Metalloberfläche, die im Rastertunnelmikroskop untersucht wurden, und die für Nanospintronik-Anwendungen relevant sein könnten [4].

WWW

<https://www.chemie.uni-hamburg.de/ac/herrmann>

Weitere Informationen

- [1] Waldrop, M. M. More than Moore *Nature* **2016**, *530*, 144-147.
- [2] Khajetoorians, A. A.; Chilian, B.; Wiebe, J.; Wiesendanger, R., Realizing All-Spin Based Logic Operations Atom by Atom *Science*, **2011**, *1062*, 1062-1064.
- [3] DiLullo, A.; Chang, S.-H.; Baadji, N.; Clark, K.; Klöckner, J.-P.; Prosenc, M.-H.; Sanvito, S.; Wiesendanger, R.; Hoffmann, G.; Hla, S.-W. Molecular Kondo Chain *Nano Lett.* **2012**, *12*, 3174-3179.
- [4] Bazarnik, M.; Bugenhagen, B.; Elsebach, M.; Sierda, E.; Frank, A.; Prosenc, M. H.; Wiesendanger, R. Toward tailored all-spin molecular devices *Nano Lett.* **2016**, *16*, 577-582.
- [5] Wahl, P.; Dieköhner, L.; Wittich, G.; Vitali, L.; Schneider, M. A.; Kern, K. *Phys. Rev. Lett.* **2005**, *95*, 166601.

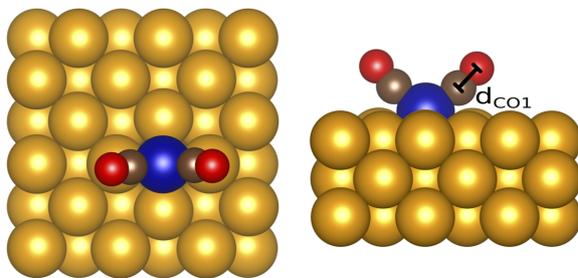


Abbildung 2: Schematische Darstellung eines Cobalt-Adsorbats auf einer Kupferoberfläche, an das zwei Carbonyl (CO)-Liganden gebunden sind.