

Ab initio Theorie elektronischer und magnetischer Störstellen in Graphen und verwandten Materialien

Prof. A. Lichtenstein, 1. Institut für Theoretische Physik, Universität Hamburg

Die derzeitige Halbleitertechnologie basiert auf dreidimensionalen Materialien wie Silizium und gerät an die Grenzen ihrer Miniaturisierbarkeit: Ungesättigte chemische Bindungen an Oberflächen oder Fremdatome führen zu starker Elektronenstreuung und limitieren so die Leistungsfähigkeit heutiger Halbleiter. Die Suche eines Post-Silizium-Materials als Basis der Halbleitertechnologie ist somit ein wichtiges Gebiet der Festkörperforschung.

Hierbei ist Graphen, d.h. eine Kohlenstoffmonolage, ein aussichtsreicher Kandidat. Es ist chemisch inert und die Graphen-Elektronen weisen eine extrem hohe Beweglichkeit auf. Dies führt zu außergewöhnlichen Transporteigenschaften wie etwa ballistischem Elektronentransport auf der technisch relevanten Mikrometerskala. Potentielle Anwendungsmöglichkeiten von Graphen umfassen die Weiterentwicklung klassischer Halbleiterbauelemente, Anwendungen im Spintronikbereich, in Hochfrequenztransistoren, sowie den Einsatz von Graphen in der Displaytechnologie.

Allgemein erfordert graphenbasierte Nanotechnologie das Verständnis von Störstelleneffekten: Störstellen sind die Bausteine nanotechnologischer Anwendungen und liefern gleichzeitig einen entscheidenden Beitrag zur Elektronenstreuung, die die Leistungsfähigkeit dieser Anwendungen begrenzt. Wegen der "ultrarelativistischen" Dispersionsrelation sind Störstelleneffekte in Graphen jedoch fundamental verschieden von analogen Effekten in konventionellen Halbleitern.

Hinsichtlich der Dispersionrelation bei kleinen Energien ähnelt Graphen den Oberflächenzuständen in topologischen Isolatoren, einer neuen und derzeit ebenfalls intensiv untersuchten Materialklasse. Auch topologische Isolatoren bieten möglicherweise eine vielversprechende Grundlage zukünftiger nanoelektronischer Anwendungen, da auch hier die Quasiteilchen durch eine ultrarelativistische Dirac-Gleichung beschrieben werden und Rückstreuung abhängig von der Symmetrie der Störstellen unterdrückt sein kann.

Wir planen den Einfluss verschiedener Substrate sowie extern erzwungener Gitterverzerrungen auf die Stabilität, die elektronischen und magnetischen Eigenschaften von Graphen-Störstellensystemen zu untersuchen. Darüber hinaus planen wir mittels Simulationen realistischer Störstellen in topologischen Isolatoren zu untersuchen, inwieweit sich unsere im Themenkomplex "Graphen" gewonnenen Erkenntnisse auf diese neuartigen "Dirac Materialien" verallgemeinern lassen. Hierzu werden wir Methoden aus dem Bereich der Dichtefunktionaltheorie einsetzen.