**Reise nach Liliput**

In seiner Doktorarbeit im nanotech@surfaces-Labor der Empa hat sich Leopold Talirz intensiv mit der Computermodellierung neuartiger Materialien beschäftigt, insbesondere mit Streifen des «Wundermaterials» Graphen. Sein Ziel: die Prüfung der Grundbausteine der Elektronik von morgen bis aufs atomare Niveau. In diesem Gastbeitrag erläutert er, was ihn antreibt und wie sein Forschungsalltag aussieht.

Text: Leopold Talirz / Bilder: Empa.

Damit eine Maschine funktioniert, müssen all ihre Rädchen ineinander greifen. Die Redewendung liest sich wie eine Selbstverständlichkeit, doch was bedeutet sie eigentlich im Detail? Muss jedes Rädchen perfekt gefertigt sein? Nein, Abweichungen sind zulässig, solange sie innerhalb der vorgeschriebenen Fertigungstoleranz liegen.

Die Toleranz des Herstellers richtet sich nach der jeweiligen Anwendung. Beim Schraubverschluss einer Plastikflasche mögen Abweichungen von bis zu einem Millimeter akzeptabel sein. Damit sich ein moderner Schlüssel im Schloss dreht, sinken die Masstoleranzen schon in den Mikrometerbereich: Hier kommt es auf die sprichwörtliche Haaresbreite an. Und wenn die edle mechanische Armbanduhr nach einem Monat noch richtig ticken soll, gerät man ins Haare-Spalten. Die Grenzen des Möglichen werden heutzutage aber nicht in mechanischen, sondern in elektronischen Geräten ausgelotet. Der Prozessor eines aktuellen Smartphones wird mit einer Genauigkeit von unter 20 Nanometern gefertigt, das ist nicht einmal ein Tausendstel einer Haaresbreite. Meine Forschung dreht sich um Materialien für die Prozessoren der Zukunft, die die ultimative Fertigungstoleranz einfordern: atomare Präzision.

Immer kleiner, immer schneller

Zunächst ein Schritt zurück: Weshalb braucht es diese extreme Genauigkeit gerade in der Digitalelektronik? Der Grund liegt im unersättlichen globalen Hunger nach Rechenleistung. Je kleiner die elektronischen Schalter, desto mehr passen auf einen Chip und desto mehr Rechenleistung kann der Chip erbringen. Noch dazu sind kleinere Schalter weniger träge und können schneller geschaltet werden. Das hat zu einer historisch einmaligen Entwicklung der Miniaturisierung geführt, deren Ergebnis wir in der Hosentasche tragen: Wunderwerke der Technik mit einer Milliarde elektronischer Schalter (Transistoren) auf der Fläche eines Daumennagels.

Das Kernstück des Transistors – der Halbleiter, der an- und ausgeschaltet werden kann – besteht nach wie vor aus dem Element Silizium. Nun entspricht eine Breite von 20 Nanometern aber bereits weniger als 100 Silizium-Atomen – da ist es nicht verwunderlich, wenn die Miniaturisierung ins Stocken gerät. Weltweit arbeiten zahlreiche Forscherinnen und Forscher an Ideen, wie sie trotzdem weiter vorangetrieben werden kann. Eine Ideen ist der Wechsel von Silizium zu «zweidimensionalen Materialien», d.h. zu Stoffen, von denen Schichten mit der Dicke eines einzelnen Atoms hergestellt werden können. Graphit, das Material in unseren Bleistiftminen, ist ein solcher Stoff. Es besteht aus äusserst stabilen Lagen von Kohlen­stoff­atomen, die vergleichsweise lose übereinandergestapelt sind und daher einfach «abgezogen» werden können. Für den Beweis, dass einzelne Atomlagen von Graphit (so genanntes Graphen) beim Abziehen intakt bleiben und herausragende elektronische Eigenschaften aufweisen, wurde André Geim und Konstantin Novoselov 2010 der Physik-Nobelpreis verliehen.

Der Knackpunkt: Graphen ist kein Halbleiter

Neben zahlreichen Vorteilen gegenüber Silizium weist Graphen jedoch ein entscheidendes Manko auf: Graphen ist kein Halbleiter, es lässt sich nicht vollständig ausschalten. Ein Graphen-Transistor ist daher eher mit einem Dimmer als mit einem Schalter zu vergleichen, und wenn eine Milliarde vernetzte Transistoren auf einem Chip den Strom jeweils bloss dimmen anstatt abschalten, dann bricht die digitale Logik zusammen.

Es gibt einen Ausweg: Sehr schmale Graphenstreifen weisen halbleitende Eigenschaften auf. Damit die Qualität ihrer Schaltung ausreicht, dürfen die Streifen jedoch nur wenige Nanometer breit sein. Und damit nicht genug: Eben weil die Streifen so schmal sind, sollten sie bis aufs Atom genau geschnitten sein. Jeder noch so kleine Fehler beeinträchtigt die Mobilität der Elektronen im angeschalteten Zustand und verlangsamt die Geschwindigkeit, mit der der Transistor geschaltet werden kann. Aber: Graphen mit atomarer Präzision in Streifen schneiden? Das hörte sich lange Zeit nach reinem Wunschdenken an.

Kurz vor Beginn meiner Doktorarbeit im nanotech@surfaces-Labor der Empa war es Forschern dort erstmals gelungen, derartige Graphenstreifen herzustellen: alle genau sieben Kohlenstoffatome breit, mit fehlerfreien Rändern. Doch wie ist das möglich? Durch einen Wechsel des Blickwinkels: Anstatt die Streifen aus Graphenschichten zurechtzuschneiden, versuchte man umgekehrt, sie aus kleineren Bausteinen zusammenzusetzen. Kollegen vom Max-Planck-Institut für Polymerforschung in Mainz synthetisierten die passenden Vorläufermoleküle für den Graphen-Bau. Dampft man diese Moleküle auf eine Oberfläche auf, auf der die Moleküle frei gleiten und ihre chemischen Andockstellen aktivieren können, so muss man nur die richtige Temperatur einstellen und ein paar Minuten warten, bis sich die Graphenstreifen von selbst zusammensetzen.

Qualitätskontrolle unterm Rastertunnelmikroskop

Der Durchbruch war also geschafft. Aber wie stellt man eigentlich fest, ob ein Streifen atomar präzis ist? Selbst mit dem besten optischen Mikroskop ist es unmöglich, die winzigen Streifen zu sehen, geschweige denn, ihre atomare Struktur zu überprüfen. Hier kommt das Rastertunnelmikroskop zu Hilfe. Es besteht im Wesentlichen aus einer scharfen Spitze, die extrem nahe über den Graphenstreifen hin und her bewegt wird. Diese Spitze «sieht» die Elektronen, d.h. sie misst, wo sich viele aufhalten und wo weniger. Da die negativ geladenen Elektronen von den positiven Atomkernen angezogen werden, kann man aus dem Bild der Elektronenverteilung die atomare Struktur der Graphenstreifen abschätzen. Leider sind solche Mikroskopbilder keine detaillierten Landkarten, sondern eher verwaschene Schnappschüsse, deren Bedeutung man erst entschlüsseln muss (Bild rechts).

An dieser Stelle kommt meine Arbeit ins Spiel. Während meine Kollegen im Labor am Rastertunnelmikroskop arbeiteten, sass ich am Computer und nutzte unser heutiges Wissen über die mathematischen Gesetze der Quantenmechanik, um vorherzusagen, wie diese Bilder aussehen sollten. Ein besonders interessanter Fall war die atomare Struktur am Ende der Graphenstreifen. Es stellte sich nämlich als schwierig heraus, Streifen mit einer Länge von mehr als 30 Nanometer herzustellen, und da lag es nahe, diejenige Stelle der Streifen unter die Lupe nehmen, an der das Wachstum gestoppt hat. Die Bilder zeigten eine Verbreiterung der Elektronenverteilung zum Ende der Streifen hin sowie eine merkwürdige Form – wie der Kopf einer Raupe mit zwei Augen und drei Fühlern. Die Enden anderer Streifen wiederum sahen ganz einfach aus wie abgeschnitten. Mysteriös – hatten sich hier ungewollte Atome eingeschlichen? Und wenn ja, wo sassen sie? Leopold, ermitteln Sie!

Der Schuldige: Wasserstoff

Die hohe Auflösung des Mikroskops sowie die extreme Sauberkeit der Experimente im Ultrahochvakuum schränkten die möglichen atomaren Strukturen auf eine Handvoll Verdächtige ein, und jeder Kandidat wurde am Computer durchgerechnet. Die Rechnungen müssen sowohl den Graphenstreifen als auch die Oberfläche berücksichtigen, auf der er sich zusammenbaut: insgesamt also Hunderte von Atomen und Tausende von Elektronen. Wie praktisch, dass man sich im Zeitalter des Internets vom Büro aus mit jedem Supercomputer der Welt verbinden und die Rechnungen dort laufen lassen kann – in diesem Fall mit dem «Monte Rosa» im Schweizer Supercomputerzentrum CSCS in Lugano.

Die Gegenüberstellung von experimentellen und berechneten Bildern lieferte klare Hinweise, dass sich Wasserstoffatome am Ende der Graphenstreifen befanden. Nur ein Wasserstoffatom erzeugt am Streifenende ein nahezu freies Elektron, welches im Mikroskopbild den «Raupenkopf» ergibt. Kommt ein zweites Wasserstoffatom hinzu, so wird das Elektron gebunden und der Raupenkopf verschwindet. Fall gelöst – doch was lernen wir daraus? Sind die Andockstellen eines Streifens durch Wasserstoff blockiert, so kann er nicht mehr wachsen. Um längere Streifen herzustellen, sollten wir also den Kontakt der Andockstellen mit Wasserstoff verhindern.

Dieser Fall ist einer von vielen, die mich während meiner Doktorarbeit beschäftigten, und unzähligen weiteren, die noch auf Aufklärung warten – der Weg zum serienreifen Graphenstreifen-Prozessor ist also noch lang. Aber eines kann ich aus Erfahrung sagen: Hat man sich einmal an atomare Präzision gewöhnt, so gibt man sie nur ungern wieder auf. //

Graphenstreifen aus dem Molekülbaukasten: Durch Aufdampfen (1) auf eine Metalloberfläche werden die Andockstellen der Molekülbausteine aktiviert (2). Die aktivierten Moleküle wandern über die Oberfläche und verbinden sich (3). Bei erhöhter Temperatur bilden sich weitere chemische Bindungen aus (4), und die Graphenstreifen sind fertig.

Kleiner Unterschied, grosse Wirkung: Die Enden der Streifen­ I (oben) und II (unten) unterscheiden sich lediglich durch ein einziges Wasserstoffatom (weiss). Trotzdem lässt das Rastertunnelmikroskop (ganz rechts), in Übereinstimmung mit der Computersimulation (Mitte), eine stark veränderte Elektronenverteilung erkennen.