

Die besonderen Eigenschaften des härtesten aller natürlichen Materialien

Diamant mit variabler Bandlücke

Normalerweise ist ein Diamant ein Isolator, aber er wird laut einem neuen theoretischen Modell zu einem metallischen Leiter, sobald er mechanischen Belastungen ausgesetzt wird.

» Henning Wriedt, USA-Korrespondent

Seit langer Zeit ist ein Diamant als das härteste aller natürlichen Materialien bekannt. Aber Diamanten sind auch aussergewöhnliche Wärmeleiter und elektrische Isolatoren. Nunmehr haben Forscher einen Weg gefunden, winzige Diamantennadeln kontrolliert zu verformen, um ihre elektronischen Eigenschaften von isolierend über halbleitend bis hin zu hochleitend oder metallisch zu verändern. Dies kann dynamisch induziert und nach Belieben wieder rückgängig gemacht werden, ohne das Diamantmaterial zu beschädigen.

Diese Forschung, die sich noch in einem frühen Proof-of-Concept-Stadium befindet, könnte nach Angaben der Forscher eine breite Palette potenzieller Anwendungen eröffnen, darunter neue Breitband-Solarzellen, hocheffiziente LEDs und Leistungselektronik sowie neue optische Komponenten oder Quantensensoren.

Erst als Möglichkeit theoretisiert, nun als Tatsache erwiesen

Ihre Erkenntnisse, die auf Simulationen, Berechnungen und früheren experimentellen Ergebnissen beruhen, wurden in den «Pro-

ceedings of the National Academy of Sciences» veröffentlicht. Der Forschungsbericht stammt von MIT-Professor Ju Li und Doktorand Zhe Shi, Principal Research Scientist Ming Dao, Professor Subra Suresh, Präsident der Nanyang Technological University in Singapur und ehemaliger Dekan der Ingenieurwissenschaften und emeritierter Professor am MIT, sowie von Evgenii Tsymbalov und Alexander Shepeev vom Skolkovo Institute of Science and Technology in Moskau.

Das Team nutzte eine Kombination aus quantenmechanischen Berechnungen, Analysen der mechanischen Verformung und maschinellem Lernen, um zu zeigen, dass das besagte Phänomen, das lange Zeit als Möglichkeit theoretisiert wurde, tatsächlich in Diamanten in Nanogrösse auftreten kann.

«Elastic Strain Engineering» entwickelt

Das Konzept, ein Halbleitermaterial wie Silizium zu verformen, um seine Performance zu verbessern, fand bereits vor mehr als zwei Jahrzehnten Anwendungen in der Mikroelektronikindustrie. Dieser Ansatz bezog sich jedoch auf kleine Dehnungen in der Grös-

senordnung von etwa 1 Prozent. Li und seine Mitarbeiter haben inzwischen Jahre damit verbracht, das Konzept des «Elastic Strain Engineering» zu entwickeln.

Dieses Verfahren basiert auf der Fähigkeit, signifikante Veränderungen in den elektronischen, optischen, thermischen und anderen Eigenschaften von Materialien zu bewirken, indem man sie einfach verformt – also einer moderaten bis grossen mechanischen Belastung aussetzt, die ausreicht, die geometrischen Anordnungen der Atome im Kristallgitter des Materials zu verändern, ohne die Gitter dabei zu zerstören.

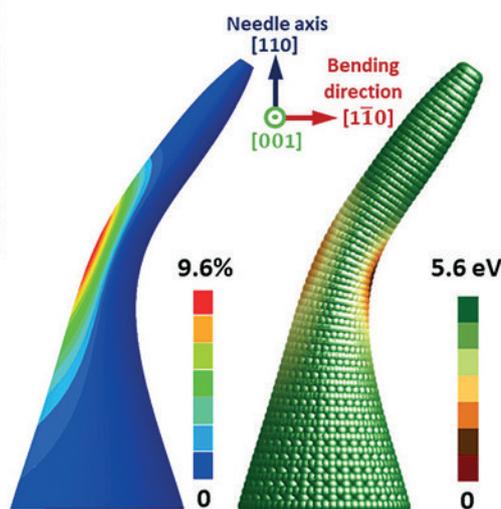
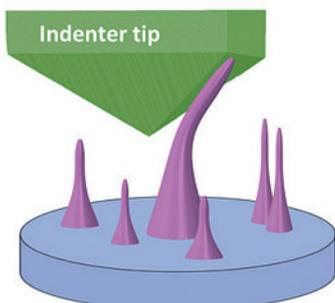
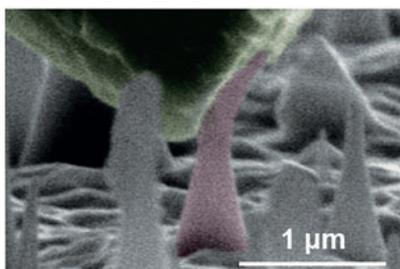
Eine besondere Materialeigenschaft

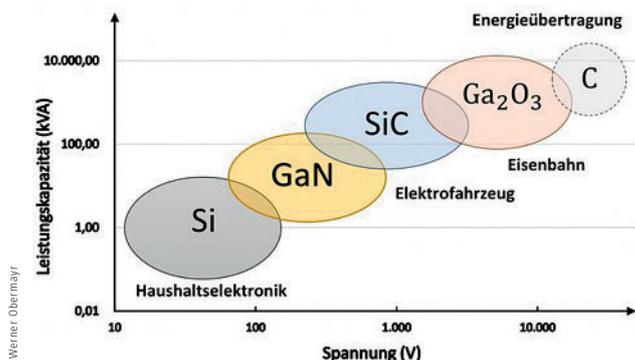
Im Jahr 2018 zeigte ein Team um Suresh, Dao und Lu Yang von der Polytechnic University of Hong Kong, dass winzige Diamantennadeln mit einem Durchmesser von nur wenigen Hundert Nanometern bei Raumtemperatur relativ weit gebogen werden konnten, ohne sie zu brechen. Sie waren in der Lage, diese Nanonadeln wiederholt auf eine Zugbelastung von bis zu 10 Prozent zu biegen; die Nadeln konnten dann unversehrt in ihre ursprüngliche Form zurückkehren.

Der Schlüssel zu diesem Forschungsprojekt ist eine Materialeigenschaft, die als Bandlücke bekannt ist. Sie bestimmt im Wesentlichen, wie leicht sich Elektronen durch ein Material bewegen können. Diese Eigenschaft ist somit entscheidend für die elektrische Leitfähigkeit des Materials.

Ein Diamant hat normalerweise eine sehr grosse Bandlücke von 5,6 Elektronenvolt, was

Winzige Diamantennadeln werden durch Biegung gedehnt, wie im Elektronenmikroskopbild oben links zu sehen ist. Computersimulationen zeigen die Auswirkungen mit normalen isolierenden Eigenschaften in grüner Farbe und Bereiche mit metallischen Eigenschaften, die nie zuvor in Diamanten gesehen wurden, in tiefem Rot.





Spannung im Vergleich zur Leistungskapazität von Transistoren auf Basis von Wide-Bandgap-Materialien: Besonders Diamant ist dank hoher Wärmeleitfähigkeit und Durchbruchspannung von speziellem Interesse.

bedeutet, dass er ein starker elektrischer Isolator ist, durch den sich Elektronen nicht so leicht bewegen können.

Den gesamten Bandlückenbereich abdecken

In ihren neuesten Simulationen zeigten die Forscher, dass die Bandlücke eines Diamanten allmählich, kontinuierlich und reversibel verändert werden kann, was eine grosse Bandbreite an elektrischen Eigenschaften bietet, und zwar vom Isolator über den Halbleiter bis hin zum Metall.

«Wir fanden heraus, dass es möglich ist, die Bandlücke von 5,6 Elektronenvolt bis auf Null zu reduzieren», sagte Li. «Der Punkt ist, wenn man kontinuierlich von 5,6 auf 0 Elektronenvolt wechseln kann, dann deckt man den gesamten Bandlückenbereich ab. Durch die Dehnungstechnik kann man Diamanten dann dazu bringen, die Bandlücke von Silizium anzunehmen, das am häufigsten als Halbleiter verwendet wird, oder von Galliumnitrid, das für LEDs verwendet wird. Man kann den Diamanten sogar zu einem Infrarotdetektor machen oder einen ganzen Lichtbereich erfassen, vom infraroten bis zum ultravioletten Teil des Spektrums.»

Eine beispiellose Flexibilität

«Die Möglichkeit, die elektrische Leitfähigkeit in Diamanten zu entwickeln und zu gestalten,

ohne seine chemische Zusammensetzung und Stabilität zu verändern, bietet eine beispiellose Flexibilität, um seine Funktionen individuell zu gestalten», sagte Suresh. «Die in dieser Arbeit demonstrierten Methoden könnten durch Strain-Engineering auf eine breite Palette anderer Halbleitermaterialien angewendet werden, die für mechanische, mikroelektronische, biomedizinische, energetische und photonische Anwendungen von technologischem Interesse sind.»

Verwendung als Breitspektrum-Photodetektoren

«So könnte zum Beispiel ein einzelnes winziges Stück Diamant, das so gebogen ist, dass es einen Dehnungsgradienten aufweist, zu einer Solarzelle werden, die in der Lage ist, alle Lichtfrequenzen auf einer einzigen Komponente einzufangen.»

«Das kann derzeit nur durch Tandemgeräte erreicht werden, die verschiedene Arten von Solarzellenmaterialien in Schichten miteinander verbinden, um ihre verschiedenen Absorptionsbänder zu kombinieren. Diese Diamanten lassen sich somit eines Tages als Breitspektrum-Photodetektoren für industrielle oder wissenschaftliche Anwendungen verwenden.»

Viel effizientere Energiesammlung

Eine Bedingung, die nicht nur die richtige Dehnungsmenge, sondern auch die richtige

Ausrichtung des Kristallgitters des Diamanten erforderte, war zu verhindern, dass die Dehnung dazu führt, dass die atomare Konfiguration einen Scheitelpunkt überschreitet und der Diamant sich dann in Grafit verwandelt.

Der Prozess kann einen Diamanten auch in zwei Halbleiterarten verwandeln, entweder in «direkte» oder «indirekte» Bandlücken-Halbleiter – abhängig von der beabsichtigten Anwendung. Für Solarzellen zum Beispiel bieten direkte Bandlücken eine viel effizientere Energiesammlung aus Licht, wodurch sie viel dünner sein können als Materialien wie Silizium, dessen indirekte Bandlücke einen viel längeren Weg aufweist, um die Energie eines Photons zu sammeln.

Das Verfahren könnte für eine Vielzahl potenzieller Anwendungen wichtig sein, so Li, etwa für hochempfindliche quantenbasierte Detektoren, die Defekte und Dotieratome in einem Diamanten nutzen. «Mit der Dehnung können wir die Emissions- und Absorptionsniveaus dieser Punktdefekte kontrollieren», sagte er, was neuartige Wege zur Kontrolle ihrer elektronischen und nuklearen Quantenzustände bietet.

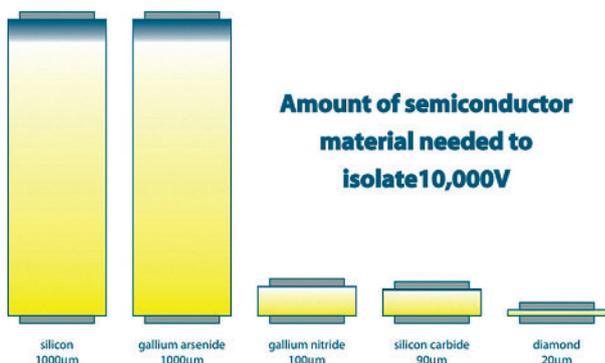
Elastische Dehnung lässt sich in Echtzeit variieren

Aber angesichts der grossen Vielfalt an Bedingungen, die durch die verschiedenen Dehnungsvariationen möglich sind, sagte Li, «wenn wir eine bestimmte Anwendung im Sinn haben, dann können wir auf dieses Anwendungsziel hin optimieren. Und das Schöne an der elastischen Dehnung ist, dass sie dynamisch ist, sodass sich je nach Bedarf eine Eigenschaft kontinuierlich in Echtzeit variieren lässt.»

Praktische Anwendungen vor Augen

Dieses frühe Proof-of-Concept Projekt ist noch nicht an dem Punkt, an dem die Forscher beginnen könnten, praktische Applikationen zu entwerfen. Aber mit der fortlaufenden Forschung erwarten die Experten, dass praktische Anwendungen bald möglich sein könnten – zum Teil auch wegen der vielversprechenden Forschungsarbeit, die auf der ganzen Welt mit dem Wachstum von homogenen Diamantmaterialien gemacht wird.

Die Arbeit wurde durch das U.S. Office of Naval Research unterstützt. <<



Diamant im Vergleich zu anderen Elektronik-Materialien.

QUELLE

<http://www.mit.edu>