

## Medienmitteilung

Dübendorf, St. Gallen, Thun, 8. November 2010

**Empa-Forschende klären Reaktionsweg zur Herstellung graphenartiger Materialien**

### Schritt für Schritt zum Nanomaterial der Zukunft

**Graphen gilt als Kandidat für die künftige Nanoelektronik. Methoden, mit denen sich graphenartige Materialien mit gewünschten elektronischen Eigenschaften herstellen lassen, fehlen jedoch noch. Empa-Forschende haben nun mit einer oberflächenchemischen Methode graphenartige Materialien synthetisiert und den entsprechenden Reaktionsmechanismus im Detail aufgeklärt, wie sie soeben in der Fachzeitschrift «Nature Chemistry» berichten. Die Forschenden stützten sich dabei auf eine Kombination von experimentellen Untersuchungen mit Computersimulationen.**

Elektronische Bauteile werden immer kleiner, sodass nach der Mikroelektronik bereits von der Nanoelektronik gesprochen wird. In diesen Dimensionen stösst Silizium, das zurzeit meistverwendete Material in elektronischen Elementen, an seine Grenzen. Neue Materialien sind gefragt. Wegen seiner aussergewöhnlichen elektronischen Eigenschaften gilt Graphen, ein zweidimensionales Kohlenstoff-Netzwerk, als möglicher Ersatz. Bevor graphenartige Materialien allerdings hierfür eingesetzt werden können, sind noch einige Hürden zu überwinden. So gibt es bislang noch keine Methoden, mit denen graphenartige Materialien einfach, zuverlässig und in grossem Massstab hergestellt werden können.

Empa-Forschende aus der Abteilung «nanotech@surfaces» setzen auf die Methode der oberflächenunterstützten Synthese. Anhand eines prototypischen Polyphenylens hat das Forschungsteam nun zusammen mit Wissenschaftlern des Max-Planck-Instituts für Polymerforschung in Mainz und der Universität Zürich im Detail aufgedeckt, wie der Reaktionsweg der so genannten Cyclodehydrierung auf einer Kupferoberfläche abläuft und wie sich die Bausteine zu einem planaren Nanographen koppeln. Die Arbeit wurde vergangenen Sonntag in der Fachzeitschrift «Nature Chemistry» als «advanced online publication» veröffentlicht.

#### **Erfolgreiche Partner: Experiment und Simulation**

Für ihre «Aufklärungsarbeit» kombinierten die Forschenden experimentelle Beobachtungen – vor allem am Rastertunnelmikroskop – mit Computersimulationen. Diese berechnen, ob ein theoretisch denkbarer Reaktionsschritt energetisch überhaupt möglich ist. Ergebnis: Der Reaktionsweg verläuft über sechs Schritte mit fünf Zwischenprodukten, wobei die Reaktionsbarrieren zwischen diesen durch die katalytische Aktivität

der Oberfläche verringert wird. Zwei Zwischenprodukte werden durch die Oberfläche derart stabilisiert, dass sie mit dem Rastertunnelmikroskop abgebildet werden konnten.

Um mit den gängigen Herstellungsverfahren der Elektronik kompatibel zu sein, eignen sich Metalloberflächen wie Kupfer allerdings nicht. Die graphenartigen Materialien müssen auf Halbleitersubstraten «wachsen». Das Forschungsteam hat mit Simulationen deshalb auch durchgerechnet, ob dies funktionieren könnte, die Resultate weisen darauf hin. Diese Erkenntnisse sind der Schlüssel dazu, die oberflächenunterstützte Synthese als zuverlässige Methode für die Herstellung von graphenartigen Materialien zu etablieren.

### **Moderne Wissenschaft basiert auf Theorie, Experiment und Simulation**

Die moderne Wissenschaft stützt sich neben Theorie und Experiment immer häufiger auf Computersimulationen. Diese werden komplementär zu oft aufwändigen Laborexperimenten eingesetzt und ermöglichen es den Forschenden, zusätzliche Informationen, die mit experimentellen Methoden nicht realisierbar wären, zu gewinnen. Dank Experimenten und Simulationen und den daraus abgeleiteten Theorien lassen sich Phänomene der Natur immer präziser abbilden und erklären.

### **Literaturangaben**

«Surface-assisted cyclodehydrogenation provides a synthetic route towards easily processable and chemically tailored nanographenes», M. Treier, C.A. Pignedoli, T. Laino, R. Rieger, K. Müllen, D. Passerone, R. Fasel, Nature Chemistry, veröffentlicht online am 7. November 2010; DOI: 10.1038/NCHEM.891

### **Weitere Informationen**

Prof. Dr. Roman Fasel, nanotech@surfaces, Tel. +41 44 823 43 48, [roman.fasel@empa.ch](mailto:roman.fasel@empa.ch)

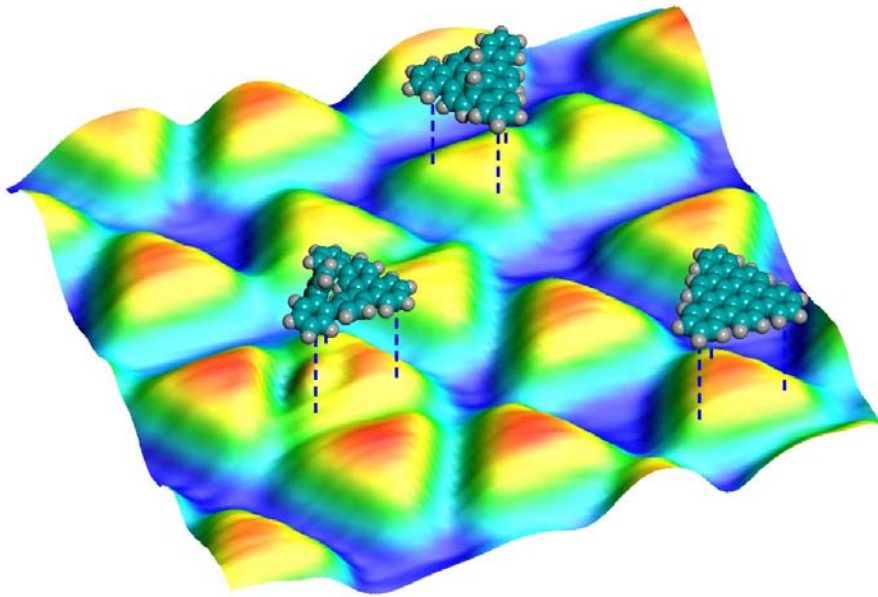
### **Redaktion / Medienkontakt**

Dr. Michael Hagmann, Kommunikation, Tel. +41 44 823 45 92, [redaktion@empa.ch](mailto:redaktion@empa.ch)

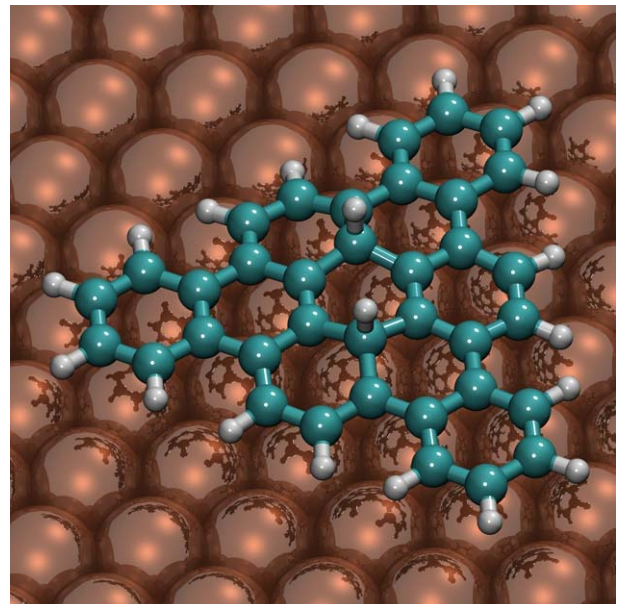
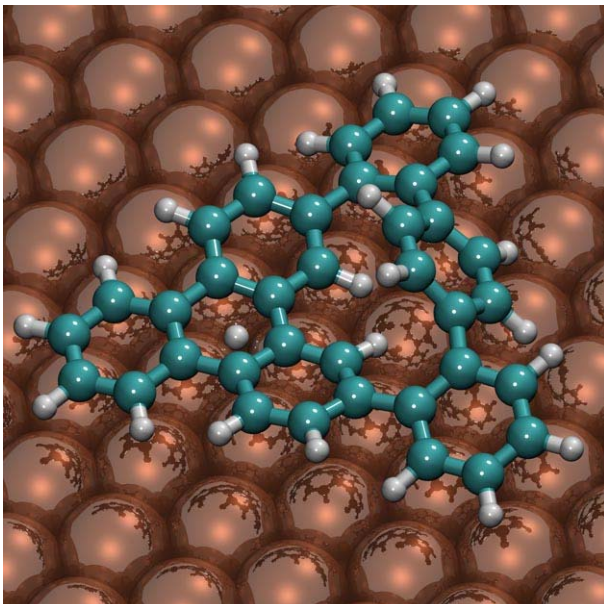
### **Schmale Nanobänder für Graphen-Transistoren**

Bereits in der «Nature»-Ausgabe vom 22. Juli 2010 hatten Forschende der Empa und des Max-Planck-Instituts für Polymerforschung berichtet, wie es ihnen erstmals gelungen war, mit ihrer Methode wenige Nanometer breite Graphenbänder wachsen zu lassen. Diese gelten als «heisse Kandidaten» für künftige Elektronikanwendungen, da sich – je nach Breite und Randform – ihre Eigenschaften einstellen lassen.

«Atomically precise bottom-up fabrication of graphene nanoribbons», J. Cai, P. Ruffieux, R. Jaafar, M. Bieri, T. Braun, S. Blankenburg, M. Muoth, A.P. Seitsonen, M. Saleh, X. Feng, K. Müllen, R. Fasel, Nature, 22 July 2010, Vol. 466, No. 7305, pp 470-473, doi:10.1038/nature09211



Durch die genaue Kenntnis von chemischen Reaktionen lassen sich diese steuern beziehungsweise die Endprodukte «massschneiden». Rastertunnelmikroskop-Aufnahme mehrerer Nanographene sowie der zwei stabilen Zwischenprodukte auf einer Kupferoberfläche. Die Molekülmodelle zeigen das Nanographen (unten rechts) sowie die beiden Zwischenprodukte (oben und links). Der Durchmesser der Moleküle liegt in der Realität bei etwa einem Nanometer.



Die computergenerierten Bilder zeigen Details der beiden theoretisch vorausgesagten Zwischenprodukte, die die Empa-Forschenden mit dem Rastertunnelmikroskop beobachten konnten.