

Abb. 1 Zweidimensionale Materialien können Metalle, Supraleiter, Halbmetalle, Halbleiter oder Isolatoren sein. Entsprechend variieren die Bandlücken der Monolagensysteme stark [3].

FESTKÖRPERPHYSIK

Vielfalt in zwei Dimensionen

Van-der-Waals-Kräfte erlauben es, aus zweidimensionalen Materialien Heterostrukturen mit maßgeschneiderten Eigenschaften aufzuschichten.

Christoph Stampfer, Bernd Beschoten und Sebastian Staacks

Neue Materialien zu entdecken und geschickt zu nutzen, ist ein Garant für den technologischen Fortschritt. Ein prominentes Beispiel ist die Rolle von Silizium in der modernen Mikroelektronik. Zweidimensionale Materialien, insbesondere kombiniert zu Van-der-Waals-Heterostrukturen, besitzen einzigartige Eigenschaften und ermöglichen eine neuartige Elektronik und integrierte Optoelektronik.

weidimensionale Materialien zeichnen sich durch außergewöhnliche Eigenschaften aus. Beispielsweise besitzen die Ladungsträger interne Freiheitsgrade wie den Spin, den Pseudospin oder den Valley-Freiheitsgrad [1]. Diese ermöglichen es, quantenmechanische Effekte technologisch zu nutzen, sodass sich die Materialien für die Spintronik und die neuartige Valleytronik anbieten. Beide Technologien ähneln der konventionellen Elektronik. Während dort Elektronen als Träger der elektrischen Ladung dazu dienen, Daten zu speichern, zu bewegen und zu verändern, nutzt die Spintronik dafür die Spinfreiheitsgrade der Elektronen – und die Valleytronik entsprechend den Valley-Freiheitsgrad.

Zweidimensionale Materialien werden aus Van-der-Waals-Materialien hergestellt. Diese besitzen eine ausgedehnte kristalline planare Struktur, die durch starke kovalente Bindungen innerhalb der Ebene und schwache Van-der-Waals-Kräfte senkrecht zu den Ebenen zusammengehalten wird. Das führt zu Schichtsystemen, wobei sich einzelne Lagen durch das Aufbrechen der Van-der-Waals-Bindungen leicht voneinander ablösen lassen, ohne den verbleibenden Kristall oder die entfernte Lage zu beschädigen. So ist es möglich, einzelne Graphen-Lagen (zweidimensionales Material) mit einem Klebeband von einem Graphitkristall (Van-der-Waals-Material) abzuziehen und auf beinahe beliebigen Oberflächen oder Substraten abzulegen. Diese technologisch sehr einfache mechanische Methode der Exfoliation ist auch auf andere Vander-Waals-Materialien anwendbar. Daher wächst derzeit die Anzahl experimentell zugänglicher zweidimensionaler Kristalle mit den unterschiedlichsten Eigenschaften rasch



Abb. 2 In der hexagonalen Gitterstruktur von Graphen (a), hexagonalem Bornitrid (b) und Übergangsmetall-Dichalkogeniden (c) zeigt sich trotz ähnlicher Einheitszelle (Raute) die fehlende Inversionssymmetrie der beiden letztgenannten Materialien (gestrichelte Linien). In der elektronischen Bandstruktur in der Nähe der K- und K'-Punkte wirkt sich dies auf die K- und K'-Valleys (rot bzw. blau) aus. Bei den Übergangs-Dichalkogeniden ist außerdem die Spin-Orientierung des Valenzbands zu beachten (schwarze Pfeile).

an. Diese Schichten lassen sich völlig unabhängig von zueinander passenden Gitterkonstanten oder Kristallorientierungen stapeln, sodass Van-der-Waals-Heterostrukturen entstehen. Die Auswahl und Abfolge der Schichten und ihre Orientierung zueinander erlauben es, die physikalischen Eigenschaften der Heterostrukturen maßzuschneidern [2].

Materialien in zwei Dimensionen

Das am meisten erforschte zweidimensionale Material ist Graphen mit seiner einzigartigen Bandstruktur und seiner außergewöhnlich hohen Ladungsträgerbeweglichkeit. Für viele Halbleiter-basierte Anwendungen ist es aber aufgrund seiner fehlenden Bandlücke nicht anwendbar. Alternativen finden sich bei anderen Van-der-Waals-Materialien, die das gesamte Spektrum elektronischer Eigenschaften abdecken (**Abb. 1**). So ist das hexagonale Bornitrid (*h*-BN) ein Isolator mit einer Bandlücke von etwa 5,9 eV. Die Familie der

Parameter einiger Übergangsmetall-Dichalkogenide

	Gitterkons- tante <i>a</i> in Å [3]	Bandlücke ⊿ in eV [3]	Geschwin- digkeit <i>v</i> in 10 ^s m/s [6]	Spinaufspaltung in eV [7]
MoS ₂	3,193	2,53	3,37	0,148
WS ₂	3,197	2,53	3,34	0,430
MoSe ₂	3,313	2,12	3,93	0,184
WSe_2	3,310	2,10	3,94	0,460

 Tabelle
 Während die Chalkogenatome Schwefel und Selen Gitterkonstante,

 Bandlücke und effektive Geschwindigkeit bestimmen, hängt die Spinaufspaltung im Valenzband von den Übergangsmetallen Molybdän und Wolfram ab.

Übergangsmetall-Dichalkogenide enthält mit MoS₂, WS₂, MSe₂ und WSe₂ Halbleiter mit Bandlücken von 1 bis 3 eV, aber auch Verbindungen mit metallischem Verhalten, die bei tiefen Temperaturen supraleitend werden, wie NbSe₂ oder RbSe₂. Diesen zweidimensionalen Materialien liegt eine hexagonale Kristallstruktur zugrunde. Sie führt zu Quasiteilchen ("Kristallelektronen"), die sich wie relativistische Teilchen verhalten, eine Chiralität aufweisen und eine nicht-triviale Berry-Phase aufsammeln können.

Zu den halbleitenden zweidimensionalen Materialien zählen auch InSe, SnS oder Schwarzer Phosphor. Dessen elektronische Bandlücke hängt stark von der Zahl der Lagen ab und beträgt zwischen 2 eV für eine Einzellage und etwa 0,3 eV für das Volumenmaterial. Einzelne Lagen von Schwarzem Phosphor haben die Struktur eines in einer ausgezeichneten Richtung verformten Blechs. Diese geometrische Anisotropie führt zu einer starken Anisotropie der Bandstruktur. Das macht die Schichten besonders interessant für integrierte optoelektronische Komponenten für die Telekommunikation im nahen und mittleren Infrarotbereich, beispielsweise neuartige Infrarot-Polarisatoren und Polarisationssensoren.

Erfolg verspricht aber nicht allein die Vielzahl der zweidimensionalen Materialien mit unterschiedlichsten Eigenschaften, sondern vor allem die einzigartige Möglichkeit, durch deren nahezu beliebiges Stapeln interessante Funktionalitäten zu integrieren und überraschende physikalische Effekte zu finden. So lässt sich zum Beispiel in eine künstlich hergestellte, etwa zehn Nanometer dünne Vander-Waals-Heterostruktur aus kontrolliert gestapelten Lagen von *h*-BN/Graphen/*h*-BN/WS₂/*h*-BN/Graphen/*h*-BN eine Leuchtdiode integrieren [4]. Neuartige Lichtquellen und Displays sind durch diesen Grad an Integration und Miniaturisierung denkbar, die technologische Umsetzung steht aber noch aus.

Im Folgenden beschränken wir uns auf die physikalischen Eigenschaften hexagonaler Kristallstrukturen in zwei Dimensionen, insbesondere Graphen, *h*-BN und die halbleitenden Übergangsmetall-Dichalkogenide. Weitere interessante Materialien wären das zweilagige Graphen mit durchstimmbarer Bandlücke, der Schwarze Phosphor mit seinen lagenabhängigen Eigenschaften, das supraleitende NbSe₂ oder auch ferromagnetische Übergangsmetall-Trihalogenide wie CrI₃ oder CrCl₃.

Physik in zwei Dimensionen

Die quantenmechanische Beschreibung der elektronischen Bandstruktur hexagonaler Kristalle, beispielsweise Graphen (Abb. 2a), lässt sich vereinfachen, indem wir die Kristallelektronen als relativistische Teilchen in der Nähe der Ecken der hexagonalen Brillouin-Zone, der K-Symmetriepunkte, beschreiben. Die Dispersionsrelation dieser Quasiteilchen ergibt für Graphen konisch zulaufende Valenz- und Leitungsbänder an den K- und K'-Punkten im Impulsraum. Die Teilchenenergie ist direkt proportional zum Impuls eine Beziehung, die an masselose relativistische Teilchen erinnert. Sie bewegen sich mit konstanter Geschwindigkeit, unabhängig von Energie oder Impuls: $E_{\pm}(k) = \pm \hbar v_{\rm F} |k|$. Die Bewegung der Quasiteilchen in Graphen entspricht daher derjenigen masseloser Teilchen, wobei die Lichtgeschwindigkeit durch die etwa dreihundertmal kleinere Fermi-Geschwindigkeit ersetzt wird: $v_{\rm F} = 10^6$ m/s.

Bei echten relativistischen Spin-1/2-Fermionen muss der Spin parallel oder antiparallel zu ihrem Impuls ausgerichtet sein. Man spricht dann von rechtshändigen bzw. linkshändigen Teilchen. Analog besitzen die Quasiteilchen im Graphen einen Pseudospin als Freiheitsgrad, der die Symmetrie der Wellenfunktionen auf den beiden dreieckigen Untergittern des hexagonalen Graphen-Gitters beschreibt [1, 5]. Befindet sich das Quasiteilchen ($E_{\pm}(k) > 0$) in einem K-Valley (K'-Valley), so ist der Pseudospin parallel (antiparallel) zum Impuls ausgerichtet. Diese chirale Natur der Ladungsträger führt zu besonderen elektronischen Eigenschaften, wie der halbzahligen Verschiebung des Quanten-Hall-Effekts [1] oder dem so genannten Klein-Tunneln durch eine beliebig große Potentialbarriere.

Viele der Eigenschaften von Graphen ergeben sich aus der linearen Bandstruktur und der fehlenden Bandlücke, beides folgt direkt aus der erhaltenen Inversionssymmetrie. Wird die Inversionssymmetrie der hexagonalen Kristallstruktur dagegen gebrochen, führt dies unmittelbar zu einer Bandlücke und zu näherungsweise parabolischen Bändern an den K-Punkten, die sich nicht berühren. Ein Beispiel dafür ist hexagonales Bornitrid (**Abb. 2b**), das die Einheitszelle statt mit gleichen Atomen wie in Graphen mit einem Borund einem Stickstoff-Atom besetzt. Dadurch öffnet sich an den K-Punkten der Brillouin-Zone eine große Bandlücke von etwa 5,9 eV und macht hexagonales Bornitrid zu einem sehr guten Isolator.

Monoschichten der Übergangsmetall-Dichalkogenide MX₂ weisen außergewöhnliche elektronische und optische

Eigenschaften auf, die es ermöglichen könnten, neuartige Transistoren zu bauen oder die Kopplung des Spin-Freiheitsgrades mit der Polarisation von eingestrahltem und ausgesandtem Licht zu bewerkstelligen. Auch sie besitzen eine hexagonale Kristallstruktur (Abb. 2c). Dabei befindet sich eine Schicht eines Übergangsmetalls M zwischen zwei Schichten von Chalkogenatomen X (Abb. 3a). Zu diesen Elementen der 6. Hauptgruppe zählen beispielsweise Schwefel, Selen und Tellur. Als Übergangsmetalle werden häufig Molybdän oder Wolfram genutzt. Eine einzelne kovalent gebundene zweidimensionale Schicht aus diesen drei Lagen hat eine Dicke von 3 bis 6 Å. Die Gitterkonstante liegt bei 3 bis 4 Å (Tabelle). Da Übergangsmetall-Dichalkogenide keine Inversionssymmetrie aufweisen, besitzen die Monoschichten der Materialklasse MX2 eine direkte Bandlücke ∆. In Analogie zu Graphen und hexagonalem Bornitrid lässt sich die Bandstruktur durch die Energiedispersion in der Nähe der K- und K'-Punkte für kleine Energien näherungsweise durch

$$E_{\pm}(\boldsymbol{k}) = \pm \sqrt{(\hbar v |\boldsymbol{k}|)^2 + (\Delta/2)^2}$$

beschreiben, wobei v eine materialabhängige effektive



Abb. 3 Die Illustrationen einer Monolage (a) und der Einheitszelle (b) eines Übergangsmetall-Dichalkogenid-Kristalls MX₂ zeigen die Position der Übergangsmetall-Atome M (grün) und der Chalkogenide X (gelb). Die elektronische Bandstruktur von MoS₂ weist insgesamt elf Bänder auf. Bei der Projektion auf die d-Schalen (c) sind das d_z²-Orbital (rot), die (d_{xy} + d_x²-y²)- und die (d_{xz} + d_{yz})-Orbitale (blau bzw. grün) zu unterscheiden. Mit der Projektion auf die p-Schalen (d) ist auch die Brillouin-Zone (Inset) gezeigt.



Abb. 4 Die Transistoranordnung besteht aus einer Monoschicht WSe₂, aufgebracht auf Siliziumoxid (SiO₂), mit Metallkontakten für Source und Drain (a). Für negative Gatterspannungen findet man Lochtransport im Valenzband (b, blau), für positive Spannungen Elektronentransport im Leitungsband (rot).

Geschwindigkeit der Ladungsträger ist (**Tabelle**). Da die Schrödinger-Gleichung in der Nähe der K-Punkte formal der Dirac-Gleichung für massebehaftete Neutrinos oder ultra-relativistische Elektronen entspricht (**Infokasten**), verhalten sich die Elektronen in den Übergangsmetall-Dichalkogeniden wie relativistische Dirac-Fermionen mit endlicher Masse (**Abb. 2c**). Weil die direkte Bandlücke dieser zweidimensionalen Halbleiter im sichtbaren Frequenzbereich liegt und sie meist eine hohe Elektronenbeweglichkeit aufweisen, sind sie vielversprechende Kandidaten für elektronische und optoelektronische Anwendungen.

Insbesondere lässt sich ihre Ladungsträgerdichte, also die Dotierung, mit einer von außen angelegten Gatterspannung V_{G} über eine kapazitiv gekoppelte hochdotierte Siliziumschicht einstellen (**Abb. 4a**). Die resultierenden Transistorstrukturen zeigen Ladungstransport durch Elektronen im Leitungsband ($V_G > 0$) oder durch Löcher im Valenzband ($V_G < 0$) in Abhängigkeit von der Fermi-Energie (**Abb. 4b**), die mittels des elektrischen Feldeffekts einstellbar ist.

Im Gegensatz zu Graphen und hexagonalem Bornitrid zeichnet sich die Bandstruktur der Übergangsmetall-Dichalkogenide durch eine starke Spin-Bahn-Kopplung aus, die auf den nur teilweise gefüllten d-Schalen der Übergangsmetallatome beruht. Diese Spin-Bahn-Kopplung spaltet das Valenzband in jeweils zwei spinpolarisierte Bänder auf. Im Leitungsband ist der Effekt ein bis zwei Größenordnungen kleiner und damit vernachlässigbar. Aus der Symmetrie der Zeitumkehr folgt, dass die Spin- und Valley-Freiheitsgrade gerade so koppeln, dass die K- und K'-Valleys entgegengesetzt polarisiert sind (**Infokasten**).

Valley-Hall-Effekt

Diese Kopplung der inneren Freiheitsgrade der Ladungsträger führt zum so genannten Valley-Hall-Effekt. Dabei bewegen sich die Ladungsträger senkrecht zur Stromrichtung ähnlich wie beim klassischen Hall-Effekt. Allerdings benötigen sie dazu kein äußeres Magnetfeld, weil die Elektronen und Löcher im Impulsraum ein effektives internes magnetisches Feld erfahren. Physikalisch resultiert das effektive Magnetfeld aus der Berry-Phase [9], die sich mit der Berry-Krümmung charakterisieren lässt. Da sich die Ladungsträger wie massebehaftete Dirac-Fermionen verhalten, ergeben sich an den K- und K'-Valleys entgegengesetzte Berry-Krümmungen der Form

Zur Bandstruktur von Übergangsmetall-Dichalkogeniden

Im Rahmen eines **Tight-Binding-Modells** lässt sich die Bandstruktur mit Hilfe von Linearkombinationen der atomaren Orbitalwellenfunktionen beschreiben. Für ein Übergangsmetall-Dichalkogenid MX₂ sind dies die Wellenfunktionen der drei p-Orbitale der beiden X-Atome (p_x, p_y, p_z) und diejenigen der fünf d-Orbitale des Metallatoms M (d_{xy}, d_{yz}, d_{xz}, d_{z²}, d_{x²-y²}). Das führt insgesamt zu elf Energiebändern. Die **Fermi-Energie** fällt mit der oberen Bandkante des siebten Bandes zusammen, welches maßgeblich von den d_{xy}- und d_{x²-y²}. Orbitalen bestimmt wird. Diese d-Orbitale bzw. nahe dem Bandminimum das d_{z²}-Orbital dominieren auch das erste Leitungsband (8. Band), sodass ein effektives Drei-Band-Modell die Bandstruktur nahe der Fermi-Energie beschreibt [7]. Dieses Modell lässt sich weiter vereinfachen, wenn die d-Orbitale des Valenzbands als Superpositionsform zusammen gefasst werden:

$$\left|\psi_{v}^{\tau}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\mathsf{d}_{x^{2}-y^{2}}\right\rangle + i\tau\left|\mathsf{d}_{xy}\right\rangle\right).$$

Dabei nimmt der Valley-Index τ die Werte $\tau = 1$ für das K-Valley und $\tau = -1$ für das K'-Valley an. Die Spinor-Basis kann durch $|\psi_1^{T}\rangle = |d_z^2\rangle$ vervollständigt werden. Somit ergibt sich die Schrödinger-Gleichung der delokalisierten d-Elektronen des M-Atoms in niedrigster Ordnung in k (relativ zu τ K) zu

$$H(\mathbf{k};\tau)\psi^{\tau} = \begin{pmatrix} \Delta/2 & at(\tau k_{x} - ik_{y}) \\ at(\tau k_{x} + ik_{y}) & -\Delta/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{y}^{\tau} \\ \psi_{y}^{\tau} \end{pmatrix}$$

wobei Δ die Bandlücke ist, *a* die Gitterkonstante und *t* ein Hüpfoder Tunnel-Matrixelement. Diese Gleichung entspricht der Dirac-Gleichung für massebehaftete Dirac-Fermionen mit $\tau = 1$: $H = \hbar v$ $\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{k} + \sigma_z \Delta/2$. Dabei ist v = at eine effektive Geschwindigkeit und $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_{x_t}, \sigma_y)$ sowie σ_z sind Pauli-Matrizen des Pseudospins.

Das vereinfachte Drei-Band-Modell zeigt anschaulich, wie die Spin-Bahn-Kopplung eine Spin-Aufspaltung des Valenzbands, nicht aber des Leistungsbands induziert. Dazu genügt es, die Quantenzahlen / und m der Atomwellenfunktionen zu betrachten. Mit

$$|d_{z^{2}}\rangle = |l, m\rangle = |2, 0\rangle, \ |d_{xy} = \frac{1}{i\sqrt{2}}(|2, 2\rangle - |2, -2\rangle) \text{ und}$$

 $|d_{x^{2}-y^{2}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2, 2\rangle + |2, -2\rangle)$

bleiben die Leitungsbandzustände in niedrigster Ordnung spinentartet (m = 0), während die Valenzbandzustände ($m = \pm 2$) spinaufgespalten werden. Unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung ergibt sich

$$H = \hbar v (\tau \sigma_x k_x + \sigma_y k_y) + \sigma_z \Delta/2 - \Delta_{SB} \tau (\sigma_z - 1) s_z,$$

wobei Δ_{sB} die induzierte Spinaufspaltung ist und s_z die Pauli-Matrix des Elektronenspins. Diese Form bewahrt die Zeitumkehrsymmetrie ($s_z \rightarrow -s_z, \tau \rightarrow -\tau$), was eine entgegengesetzte Spinaufspaltung in den Valenzbändern jedes Valleys impliziert.



Abb. 5 Beim Valley-Hall-Effekt sammeln sich die Ladungsträger (a, hier: Löcher in WSe₂) abhängig von ihrem Valley am rechten (blau) und linken Rand (rot) des Übergangsmetall-Dichalkogenids. Diese Polarisation führt zu leicht verschiedenen Besetzungszahlen des Valenzbands in den beiden Valleys und damit zu einer unterschiedlichen Bandlücke σ^+ zum Leitungsband (b). Linear polarisiertes Licht wird bei der Reflexion um den Winkel θ_{κ} gedreht (c). Bestimmt man diesen ortsaufgelöst (d), lässt sich die Valley-Polarisation ablesen.

$$\Omega(k) = \tau \, \frac{2\nu^2 \Delta}{(\Delta^2 + 4\nu^2 \, |k|^2)^{3/2}} \, e_z, \tag{1}$$

wobei e_z , der Einheitsvektor in z-Richtung, senkrecht zur Ebene des zweidimensionalen Materials steht [10]. Auf die Elektronen beider Valleys wirken daher im *k*-Raum effektive Magnetfelder senkrecht zur Schichtebene mit gleicher Größe proportional zu Ω , aber mit entgegensetzten Vorzeichen. Liegt nun ein äußeres elektrisches Feld zwischen Source- und Drain-Kontakt an (**Abb. 4a**), fließt ein longitudinaler elektrischer Strom, der eine senkrecht gerichtete Nettostromdichte von Valley-polarisierten K- und K'-Ladungsträgern induziert.

In einer semiklassischen Transportgleichung drückt ein Lorentz-artiger Term die effektiven Magnetfelder aus:

$$\dot{r} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{\pm}}{\partial k} - \dot{k} \times \Omega, \qquad (2)$$

wobei r der in der Ebene liegende Ortsvektor der sich bewegenden Elektronen ist. Das angelegte elektrische Feld E führt zu der für den Valley-Hall-Effekt erforderlichen Impulsänderung.

Außerdem gilt unter Berücksichtigung der Lorentz-Kraft $\hbar \dot{k} = -eE - e\dot{r} \times B$. Dieser Ausdruck unterstreicht die Analogie zwischen äußerem Magnetfeld *B* und Berry-Krümmung Ω und zeigt zusammen mit Gl. (1) und (2), dass die Valley-abhängige Ablenkung der Ladungsträger auch ohne äußeres Magnetfeld (*B* = 0) möglich ist. Da die Ladungsträger in den beiden Valleys dabei entgegengesetzte Lorentz-artige Kräfte erfahren, bewegen sie sich auch in entgegengesetzte Richtungen senkrecht zum Driftstrom.

Durch den Valley-Hall-Effekt wird der zunächst unpolarisierte Valley-Strom an den Rändern des Übergangsmetall-Dichalkogenids Valley-selektiv polarisiert. Dabei sammeln sich freie Löcher des Valenzbands aus dem K-Valley am linken Rand der Probe, während diejenigen aus dem K'-Valley an den rechten Rand abgelenkt werden (**Abb. 5a**). In Analogie zur Spinelektronik klassischer Halbleiter lassen sich diese Valley-Polarisationen als eine Spinpolarisation mit entgegengesetzten Ausrichtungen der Spins ansehen, ähnlich derjenigen, die ein elektrischer Strom in III-V-Halbleitern beim Spin-Hall-Effekt erzeugt [11]. Die Netto-Valley-Polarisation ergibt unterschiedliche Besetzungszahlen für die K- und K'-Valleys im Valenzband (**Abb. 5b**). Dadurch sind die Valley-abhängigen optischen Übergänge energetisch leicht zueinander verschoben, und es kommt zu einer unterschiedlichen Reflektivität von rechts- und linkszirkular polarisiertem Licht. Dieser zirkulare Dichroismus ist direkt mit einer magneto-optischen Kerr-Rotation verknüpft, die eine Polarisationsdrehung von linear polarisiertem Licht erzeugt (**Abb. 5c**). Ortsaufgelöste Messungen der Kerr-Rotation bilden daher die Valley-Polarisationen direkt ab (**Abb. 5d**). Dabei wechselt das Vorzeichen der Valley-Polarisationen an den beiden Probenrändern beim Übergang von der Loch- zur Elektronenleitung, sodass die Kerr-Rotation ortsaufgelöst betrachtet gespiegelt wird.

Van-der-Waals-Heterostrukturen

Wie eingangs erwähnt, bietet das Stapeln unterschiedlicher zweidimensionaler Materialien die Möglichkeit, die physikalischen Eigenschaften der resultierenden Heterostrukturen für eine technologische Anwendung maßzuschneidern. Zusammengehalten durch Van-der-Waals-Kräfte ergeben sich weitaus mehr Kombinationen künstlicher Schichtmaterialien, als es konventionelle Wachstumsmethoden wie die Molekularstrahlepitaxie ermöglichen. Derzeit stehen dafür mehrere Tausend zweidimensionaler Materialien zur Verfügung [12].

Weil die Van-der-Waals-Kräfte nur schwach sind, lässt sich zwischen den Schichten ein "Verdrehwinkel" präzise einstellen. Zwischen zwei benachbarten zweidimensionalen Kristallen wirkt er als neuer Freiheitsgrad (**Abb. 6**). So entstehen zum Beispiel beim Verdrehen von Graphen und hexagonalem Bornitrid bei kleinen Winkeln periodische Übergitter. Da die geometrische Struktur beider Materialien praktisch identisch ist, treten Moiré-Muster mit großer Periodenlänge auf. Die Elektronen im Graphen bewegen sich daraufhin in einem langwelligen periodischen Potential, welches dem Übergitter entspricht. Mit starken Magnetfeldern ist es dann beispielsweise möglich, ein elektronisches System zu untersuchen, dessen selbstähnliches Energiespektrum einem Schmetterling gleicht (Hofstadter-Spektrum, [13]).

Zwei relativ zueinander beliebig verdrehte Graphen-Lagen heißen "Twisted Bilayer"-Graphen. Bei großen



Abb. 6 Van der Waals-Heterostrukturen ergeben sich aus dem Stapeln eindimensionaler Materialien. Beispiele sind Graphen auf hexagonalem Bornitrid und Graphen auf Graphen (a). Verschieden große Verdrehwinkel erzeugen periodische Übergitter oder Moiré-Muster (b).

Verdrehwinkeln verhalten sie sich wie zwei unabhängige Graphen-Lagen. Dagegen kommt es bei sehr kleinen Verdrehwinkeln zu einer sehr starken elektronischen Wechselwirkung, die ein Netzwerk eindimensionaler topologisch geschützter Transportkanäle ausbilden kann. Insbesondere beim "magischen Winkel" $\vartheta \approx 1,1^{\circ}$ verändert sich die elektronische Bandstruktur nahe der Fermi-Energie stark (Abb. 6b). Hier ergeben sich sehr flache elektronische Bänder, deren Besetzung sich über die Feldeffekt-abhängige Ladungsträgerdichte kontrollieren lässt und die zu einer sehr starken Elektron-Elektron-Wechselwirkung führen. Letztere sorgt dafür, dass in derartigem "Twisted-Bilayer"-Graphen unkonventionelle korrelierte isolierende Zustände, magnetische Phasen mit ferromagnetischer Wechselwirkung und sogar Supraleitung nachgewiesen werden konnten [14]. Da diese physikalischen Effekte häufig mit der hexagonalen Kristallstruktur sowie der K- und K'-Valley-Kopplung zusammenhängen, ist davon auszugehen, dass verwandte Effekte auch in anderen kontrolliert verdrehten Heterostrukturen auftreten.

Die physikalischen Eigenschaften zweidimensionaler Materialien mit einer hexagonalen Kristallstruktur, ob als einzelne Lage oder in Form einer Van-der-Waals-Heterostruktur, machen diese Materialien interessant für zukünftige Anwendungen in der Optoelektronik, der Spintronik und der Valleytronik, aber auch für die Quanteninformation. Breitbandige CCD-Kameras, flexible WiFi-Empfänger oder hochbiegsame und faltbare Touchscreens könnten damit möglich sein. Darüber hinaus erlauben es die ungewöhnlichen elektrischen Eigenschaften dieser Systeme, quantenelektrodynamische Systeme zu simulieren und wichtige Fragen zur Physik stark korrelierter Elektronensysteme zu adressieren. So könnten eines Tages Van-der-Waals-Heterostrukturen eine Schlüsselrolle spielen, um die Geheimnisse der Hochtemperatur-Supraleitung zu lüften.

Wir möchten uns bei unseren zahlreichen Kollegen bedanken, mit denen wir uns über das stetig wachsende Feld der zweidimensionalen Materialien und daraus resultierenden Van-der-Waals-Heterostrukturen austauschen konnten. Insbesondere sind das Luca Banszerus, Guido Burkard, Fabian Hassler, Max Lemme, Florian Libisch, Markus Morgenstern, Daniel Neumaier, Jens Sonntag, Gerard Verbiest, Frank Volmer und Ludger Wirtz.

Literatur

- [1] B. Trauzettel, Physik Journal, Juli 2007, S. 39
- [2] A. K. Geim und I. Grigorieva, Nature 499, 419 (2013)
- [3] S. Haastrup et al., 2D Materials 5, 042002 (2018)
- [4] F. Withers et al., Nat. Mater. 14, 301 (2015)
- [5] *G Burkard*, Physik Journal, Januar 2014, S. 35
- [6] A. Kormányos et al., 2D Materials 2, 022001 (2015)
- [7] Gui-Bin Liu et al., Phys. Rev. B 88, 085433 (2013)
- [8] E. Barré et al., Nano Lett. 19, 770 (2019)
- [9] S. Keppler, Physik Journal, Februar 2004, S. 45
- [10] J. R. Schaibley et al., Nat. Rev. Mater. 1, 16055 (2016)
- [11] Y. K. Kato et al., Science **306**, 1910 (2004)
- [12] N. Mounet et al. Nat. Nanotechnol. 13, 246 (2018)
- [13] C. R. Dean et al. Nature **497**, 598 (2013)
- [14] Y. Cao et al., Nature 556, 43 (2018)

Die Autoren

Christoph Stampfer (FV Halbleiterphysik, FV Metall- und Materialphysik) studierte Physik an der TU Wien und promovierte 2007 an der ETH Zürich in Maschinenbau. Als Postdoc wechselte er in die Experimentalphysik und folgte 2009 einem Ruf an die RWTH Aachen, wo er seit 2013 W3-Professor ist.

Bernd Beschoten (FV Halbleiterphysik, FV Magnetismus) promovierte 1997 an der RWTH Aachen. Seit 2001 leitet er dort die Arbeitsgruppe Spinelektronik am 2. Physikalischen Institut. Sebastian Staacks schloss 2014 seine Promotion in experimenteller Festkörperphysik ab und ist derzeit akademischer Rat an der RWTH Aachen.

Prof. Dr. Christoph Stampfer, Dr. Bernd Beschoten und Dr. Sebastian Staacks, Fachbereich Physik, RWTH Aachen, Otto-Blumenthal-Str., 52074 Aachen

