

Wie Molekülschwingungen Wärme leiten

Erstmals ist es gelungen, die Wärmeleitfähigkeit eines einzelnen isolierenden Moleküls zu messen.

Heiko B. Weber und Matthias A. Popp

Dieses Experiment haben die meisten von uns schon als Kind durchgeführt: Fasst man mit dem warmen Finger bei Umgebungstemperatur auf Metall, fühlt es sich kühl an, bei Styropor dagegen warm. Grund dafür ist die unterschiedliche Wärmeleitung beider Materialien: Beim gut leitenden Metall fließt die Wärme schnell aus dem Finger, sodass dieser etwas abkühlt. Beim isolierenden Styropor ist das nicht der Fall. Ob sich dieses Konzept auch auf die Skala einzelner Moleküle übertragen lässt, ist Thema einer aktuellen Veröffentlichung eines internationalen Teams von Physikern [1].

Seit etwa 20 Jahren wird das analoge Problem des elektrischen Ladungstransports durch ein einzelnes Molekül intensiv erforscht. Als gängiges Instrument, einzelne Moleküle elektrisch zu kontaktieren, hat sich dabei ein hochstabiles Rastertunnelmikroskop etabliert. Die Tunnelspitze nähert sich einer metallischen Oberfläche – beschichtet mit einer Einzellschicht von Molekülen –, bis es zum elektrischen Kontakt kommt. Beim anschließenden Herausziehen der Spitze bildet sich unter passenden Umständen ein Einzelmolekülkontakt, der sich elektrisch charakterisieren lässt [2]. Diese und ähnliche Methoden erlauben es, den Leitwert einzelner Moleküle zu messen. Dieser hängt von vielen atomistischen Details ab, beispielsweise von den Molekülen in unmittelbarer Nähe, von der Position der einzelnen Atome oder von der Art, wie die Bindung zu den Metallelektroden erfolgt [3].

Auch die Wärmeleitfähigkeit eines Einzelmolekülkontakts ist auf ähnliche Weise zu bestimmen. Dafür wurde eine beheizbare Tunnelspitze konzipiert, die wärmer ist als das Substrat und eine Messung der Temperatur an der Spitze ermöglicht (**Abb. 1**). Mit diesem Aufbau gelang es bereits, die Wärmeleitung durch ein Goldatom, also einen atomar dünnen me-

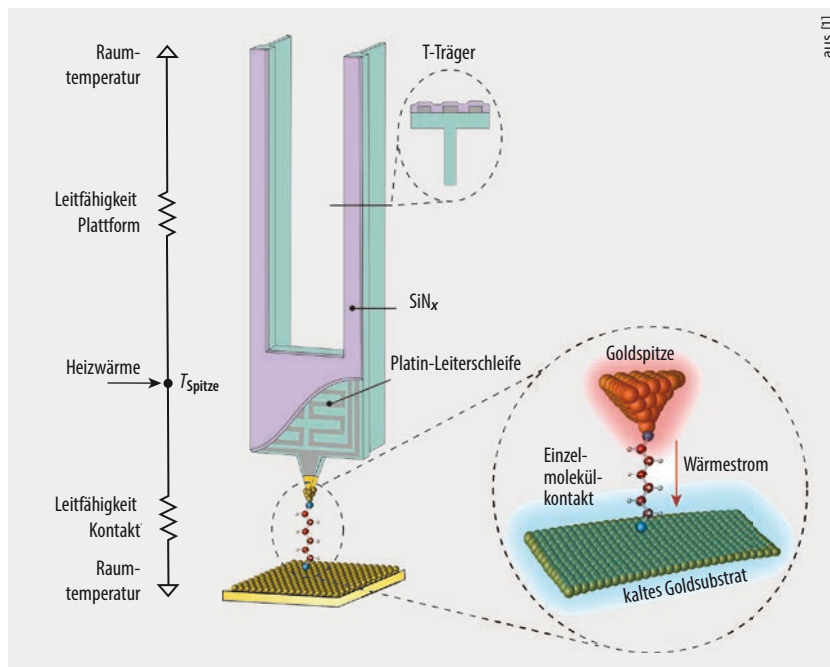


Abb. 1 Mit der Spitze eines Rastertunnelmikroskops lässt sich der Wärmestrom durch ein einzelnes Molekül messen. Eine Leiterschleife aus Platin befindet sich auf einer an T-Trägern montierten Plattform und dient als Heizung und Thermometer. Aus der Temperatur ergibt sich der Wärmestrom, der durch das Molekül abfließt, entsprechend dem Schaltbild links.

tallischen Kontakt, zu bestimmen und zu analysieren [4]. Die Wärme wird hier vor allem von den Elektronen übertragen; deshalb ergibt sich analog zur makroskopischen Physik ein Wiedemann-Franz-Gesetz: Wärmeleitfähigkeit und elektrische Leitfähigkeit stehen in einem einfachen Verhältnis zueinander, weil sie letztlich auf dem gleichen Transportmechanismus beruhen. Bemerkenswerterweise treten beide Leitfähigkeiten quantisiert auf.

Im jetzt vorliegenden Experiment geht es darum, an einem isolierenden Molekül die phononische Wärmeleitfähigkeit zu untersuchen. Als Prototypen isolierender Moleküle kamen Alkanketten mit zwei Thiol-, also Schwefel-Enden zum Einsatz. Diese Moleküle besitzen eine große Energielücke. Ihre elektrische Leitfähigkeit nimmt exponentiell mit der Kettenlänge ab, weil sie im Wesentlichen auf dem Tunneln durch die Kette beruht. Die Thiol-Enden sorgen für eine sta-

bile chemische Bindung an die metallischen Elektroden. Das Experiment erfolgte bei Raumtemperatur, wobei die Tunnelspitze auf Temperaturen zwischen 320 und 340 K aufgeheizt wurde. Als Messgröße diente der Temperaturanstieg an der Spitze nach dem Abreißen des Molekülkontakts, in zeitlicher Umkehr des eingangs erwähnten Fingerexperiments. Der Abreißpunkt ergibt sich aus der gleichzeitigen elektrischen Charakterisierung des Kontakts. Da der Temperaturanstieg sehr gering ausfiel, war es erforderlich, über hunderte von Abreißzyklen zu mitteln, jeweils kalibriert auf den Zeitpunkt des Abreißens.

Hierbei zeigte sich, dass sich die Alkanketten $S(CH_2)_nS$ durch eine phononische Wärmeleitung von etwa 15 pW/K auszeichnen. Diese ist weitgehend unabhängig von der Kettenlänge n , zumindest für die untersuchten Werte von $n = 2$ bis 10

(Abb. 2). Dies gilt auch bei kurzen Kettenlängen, wo zusätzlich zur phononischen Wärmeleitung die elektronische Wärmeleitung nicht zu vernachlässigen ist. Diese Beiträge ließen sich aber überzeugend separieren.

Die zugrundeliegenden Prozesse lassen sich mit einer mikroskopischen Theorie beschreiben. Es wurde eine Theorie der phononischen Wärmeleitung aufgestellt, die weitgehend analog zum besser bekannten elektronischen Transport in Nanokontakten ist (Landauer-Büttiker-Formalismus). In diesem Formalismus entspricht der Wärmetransport einem quantenmechanischen Streuproblem von Phononen der Energie E am Übergang zwischen zwei idealisierten Festkörpern. Die Transmissionswahrscheinlichkeit $\tau(E)$ der Phononen wird für jede Energie E berechnet. Gewichtet mit den thermodynamischen Besetzungswahrscheinlichkeiten folgt aus deren Summe der Wärmestrom bei gegebenem Temperaturunterschied.

In Theorie und Experiment laufen die Transportphänomene auf mikroskopischer Skala völlig anders ab als auf der makroskopischen. Während makroskopisch betrachtet der Wärmewiderstand und der elektrische Widerstand im Sinne eines Ohmschen Gesetzes proportional zur Länge und umgekehrt proportional zum Querschnitt des Kontakts sind, sind mikroskopisch beide Phänomene als Streuproblem zu verstehen. Dabei un-

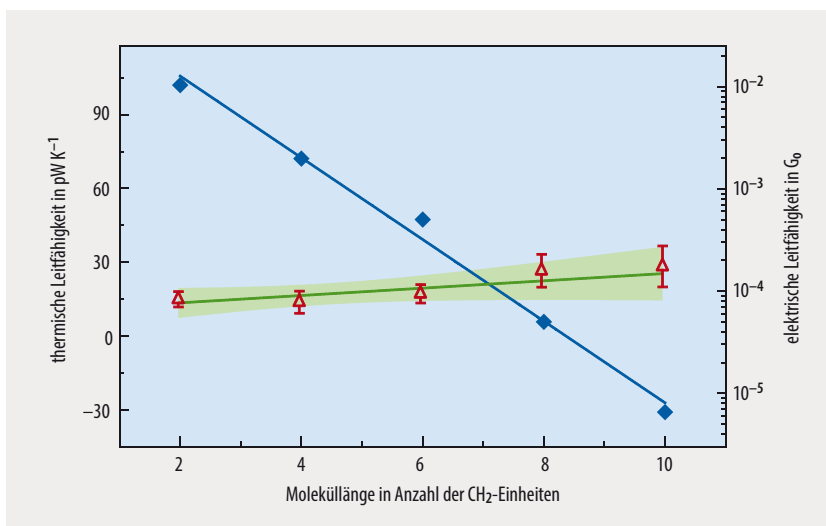


Abb. 2 Die elektrische Leitfähigkeit (blau) nimmt exponentiell mit der Länge der Moleküle ab, während die thermische Leitfähigkeit (rot) innerhalb eines Vertrauensniveaus von 95 Prozent (grün) nahezu konstant bleibt.

terscheidet sich für Alkanketten der Länge n die exponentiell abklingende elektrische Leitfähigkeit auch qualitativ von der konstanten phononischen Wärmeleitfähigkeit.

Erstmals ist es nun also gelungen, die Frage nach der Wärmeleitung durch ein einzelnes isolierendes Molekül experimentell und theoretisch zu beantworten. Das daraus gewonnene Verständnis der phononischen Wärmeleitung ist auch wichtig für anwendungsorientierte Fragen, beispielsweise um thermoelektrisch aus allgegenwärtigen Temperaturdifferenzen an Molekülgrrenzflächen elektrische Leistung zu ziehen. Hier stellt die phononische Wärmeleitfähigkeit

einen thermischen Kurzschluss dar. Dagegen kann sie es in elektronischen Bauelementen auf Basis molekularer Materialien erlauben, Wärme abzutransportieren.

- [1] L. Cui et al., Nature 572, 628 (2019)
- [2] X. D. Cui et al., Science 294, 571 (2001)
- [3] J. Reichert et al., Phys. Rev. Lett. 88, 176804 (2002)
- [4] L. Cui et al., Science 355, 1192 (2017)

Autoren

Prof. Dr. Heiko B. Weber und **Matthias A. Popp, M. Sc.**, Lehrstuhl für Angewandte Physik, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Staudtstr. 7, 91058 Erlangen

Kurzgefasst

Cäsium-Dampf als Detektor

Bei der Suche nach Dunkler Materie in Form sehr leichter Bosonen macht Cäsium-Dampf einen bisher unerforschten Massenbereich zugänglich. Die in Mainz entwickelte Methode nutzt die Atomspektroskopie von Cs-Atomen und prüft, ob deren Anregungsfrequenz variiert. Das könnte im Rahmen der sog. Relaxion-Theorie auf eine Wechselwirkung mit Dunkler Materie hinweisen.

D. Antypas et al., Phys. Rev. Lett. 123, 141102 (2019)

Ein Exoplanet mit Wasserdampf

Im Sternbild Löwe, 110 Lichtjahre von der Erde entfernt, umkreist der Planet K2-18b einen Roten Zwerg in der habitablen Zone. Forschern des University College London ist

es nun gelungen, die Atmosphäre des Exoplaneten zu analysieren. Dazu verwendeten sie Daten des Hubble-Weltraumteleskops und entdeckten Spuren von Wasserdampf, Wasserstoff und Helium. Damit ist die Supererde K2-18b der erste Exoplanet, der die wichtigsten Voraussetzungen für die Entwicklung von Leben erfüllt.

A. Tsiaras et al., Nat. Astron. (2019), DOI: 10.1038/s41550-019-0878-9

Neutrinoloser Zerfall?

Das GERDA-Experiment dient im italienischen Untergrundlabor Gran Sasso der Suche nach dem neutrinolosen doppelten Betazerfall des Isotops ⁷⁶Ge. Dabei wandeln sich zwei Neutronen gleichzeitig in jeweils zwei Protonen und zwei Elektronen um. Anders als im Stan-

dardmodell beschrieben, werden keine Neutrinos emittiert, weil diese als Majorana-Teilchen ihre eigenen Antiteilchen sind. GERDA hat als weltweit empfindlichstes Instrument als Untergrenze der Halbwertszeit des Zerfalls 10²⁶ Jahre bestimmt. Die Kombination mit Ergebnissen anderer Experimente zum doppelten Betazerfall ergibt eine Neutrinomasse von 0,07 bis 0,16 eV/c² – im Einklang mit Daten der Planck-Mission.

LEGEND, das Nachfolgeprojekt von GERDA, soll mit der mehr als fünffachen Detektormasse die Empfindlichkeit verzehnfachen.

M. Agostini et al. (GERDA Collaboration), Science 365, 1445 (2019)

