

Materials and Energy – New directions for the „Energiewende“

773. WE-Heraeus-Seminar

„Energie“ und „Materialien“ haben eine übergreifende Bedeutung für die zukünftige Entwicklung unserer Gesellschaft. Sie sind auf vielfältige Weise miteinander verbunden, von der Grundlagenforschung bis hin zu realen Anwendungen. Im Rahmen dieses Seminars, das vom 23. bis 27. Oktober 2022 im Physikzentrum Bad Honnef stattfand, standen die großen technologischen Herausforderungen der Energiewende im Vordergrund. Materialien spielen eine zentrale Rolle in unserem zukünftigen Energiesystem: für Energiespeicherung, -umwandlung und -transport, aber auch bei den energieintensiven Baumaterialien Stahl und Zement. Um neuartige, hocheffiziente Werkstoffe und Verfahren im industriellen Maßstab verfügbar zu machen, gilt es, Stoffkreisläufe zu schließen und Recycling zu erleichtern.

Aus wissenschaftlicher Sicht kommt es bei Werkstoffen im Energiebereich auf die Leistungsfähigkeit von Oberflächen, Grenzflächen und Morphologie, die Kontrolle von Phasenübergängen und das Verhältnis dieser Eigenschaften zu den oft anspruchsvollen Bedingungen in Anwendungen an. Ein übergreifendes Thema, das in vielfältiger Weise aufgegriffen wurde, ist das Verständnis der grundlegenden Funktionalitäten und ihrer Stabilität unter Anwendungsbedingungen, das Entdecken, Bewerten und Entwickeln neuer Materialsysteme. Dabei gewinnen Materialien nur dann Relevanz, wenn es gelingt, die technologischen Fähigkeiten zu entwickeln, um neue Materialien und grundlegende Ansätze vom Labor auf die Systemebene zu übertragen. Dies erfordert ein Verständnis aller Prozesse entlang der Systemintegrationskette und ihrer gegenseitigen Abhängigkeiten, um die bisher oft langwierige Entwicklung von der Entdeckung neuer Ansätze bis zu deren Realisierung im System zu überwinden. Hierzu versprechen Hochdurchsatzmethoden und datenwissenschaftliche Ansätze ein großes Potenzial. Zur beschleunigten Entwicklung von Technologien im Kontext der Energiewende gilt es also, Akteure zu vernetzen, von der Grundlagenforschung bis zur Systemintegration, aber auch über die vielfältigen Bereiche der Funktionsmaterialien und der Materialverarbeitung hinweg, um Synergien zu identifizieren und zu nutzen. In diesem Sinne hat das Seminar „Materials and Energy“ mit seinen 80 Teilnehmenden aus mehreren Ländern erfolgreich zur Netzwerkbildung beigetragen. Wir danken der WE-Heraeus-Stiftung für die organisatorische Unterstützung und die Finanzierung des Seminars.

Prof. Dr. Jürgen Janek, U Gießen und
Prof. Dr. Christof Schulz, U Duisburg-Essen

Towards Comprehension of Chiral Induced Spin Selectivity

775. WE-Heraeus-Seminar

Chiral induzierte Spin-Selektivität (CISS) ist ein Phänomen, das seit etwa 30 Jahren experimentell erforscht wird. Dabei hängt die Wahrscheinlichkeit eines Elektrons, durch ein chirales Molekül oder einen chiralen Festkörper transportiert zu werden, von der Ausrichtung seines Spins ab. Interessanterweise beobachtet man dies in geschlossenschaligen, also nichtmagnetischen Molekülen und Festkörpern. Eine Erklärung hierfür ist die Spin-Bahn-Kopplung, kombiniert mit dem Bruch von Inversions- und Zeitumkehrsymmetrie. Allerdings erstaunt es, dass die Spin-Selektivität so groß ist (bis ca. 80 %), obwohl die intrinsische Spin-Bahn-Kopplung der beteiligten Systeme oft klein ist (zum Beispiel DNS und Peptide, die aus leichten Atomen aufgebaut sind). Hierfür gibt es aktuell keine allgemein akzeptierte Erklärung. Ziel dieses Seminars, das vom 5. bis 8. Dezember 2022 im Physikzentrum Bad Honnef stattfand, war es, Wissenschaftler:innen aus Theorie und Experiment zusammenzubringen, um in Richtung einer solchen Erklärung Fortschritte zu machen. Die Vorteile eines besseren Verständnisses wären immens – neben dem grundsätzlichen Interesse und der biologischen Relevanz kann CISS unter anderem Elektrokatalyse (und damit Wasserstoffproduktion) günstiger machen und wird für die Initialisierung und das Auslesen von Qubits diskutiert. Aktuell tappt man aber im Dunkeln, was das gezielte Design von geeigneten Systemen für solche Anwendungen angeht.

Im Rahmen des Seminars wurden in 20 Vorträgen viele Aspekte von CISS angesprochen, darunter aktuelle Übersichten über Elektronenleitungs- und Photoelektronen-Experimente, die Synthese interessanter chiraler Systeme sowie erreichte und mögliche neue Anwendungen. Hinzu kamen neue theoretische Entwicklungen wie ein Mechanismus für die Spinpolarisierung der Elektronenstruktur durch CISS, die Bedeutung der Elektron-Phonon-Kopplung, die Aharonov-Casher-Phase oder die Bedeutung der Grenzfläche zwischen Molekül und Elektrode. Es wurde klar, wie vielfältig CISS im Experiment ist. So hängt der Effekt je nach System und Bedingungen unterschiedlich von der Temperatur ab, und es ist nicht immer trivial, den Einfluss der Temperatur auf die Spin-Selektivität von ihrem Einfluss auf den Ladungstransport an sich zu trennen. Ebenfalls wurde klar, dass ein besseres Verständnis neue Arten von Experimenten erfordert, etwa bei tiefen Temperaturen und unter Verwendung von Kern- und Elektronenspinresonanz sowie Rastertunnelmikroskopie. Hierzu wurden neue Entwicklungen vorgestellt, unter anderem

in einer Postersitzung, an der sich neben etablierten Forschenden auch viele hervorragende Nachwuchswissenschaftler:innen beteiligten.

Es gab viele positive Rückmeldungen der 55 Teilnehmenden, gerade auch von den Jüngeren, und es wurde der Wunsch geäußert, sich in diesem Rahmen noch einmal zu treffen. Ein großer Dank geht an die Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die großzügige finanzielle und hervorragende organisatorische Unterstützung.

Prof. Dr. Carmen Herrmann, U Hamburg
und **Prof. Dr. Jonas Fransson**, U Uppsala,
Schweden

Re-thinking Spintronics: From Unconventional Ma- terials to Novel Technologies

776. WE-Heraeus-Seminar

Dieses Seminar, das vom 4. bis 6. Januar 2023 im Physikzentrum Bad Honnef stattfand, brachte bedeutende Expertinnen und Experten aus dem Bereich Magnetismus und Materialwissenschaft zusammen, darunter führende nationale und internationale Forschende sowie junge Nachwuchswissenschaftlerinnen und -wissenschaftler. Die Teilnehmer diskutierten aktuelle Fortschritte und Herausforderungen in der Theorie, experimentellen Techniken und numerischen Methoden im Bereich der Spintronik.

Einer der Höhepunkte des Seminars war der Vortrag von Libor Šmejkal, der eine neue Klasse von magnetischen Materialien vorstellte, die Altermagnete. Yossi Paltiel demonstrierte die bemerkenswerte Effizienz des chiral-induzierten Spin-Selektivitätseffekts in hybriden Molekül-Magnet-Systemen, während Claas Abert Hochleistungsberechnungen für Mikromagnetismus präsentierte.

Neben den wissenschaftlichen Vorträgen wurde auch die Bedeutung von Vielfalt, Gleichberechtigung und Inklusion in der Wissenschaft thematisiert. Dies unterstreicht das Engagement des Seminars, eine offene und inklusive Umgebung für den interdisziplinären Austausch von Ideen und Forschungsergebnissen zu schaffen. Insgesamt hat das Seminar den interdisziplinären Austausch gefördert und neue Forschungsrichtungen angeregt, indem es neue Ideen und Technologien vorstellte und diskutierte.

Wir danken der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die organisatorische Betreuung und finanzielle Förderung des Seminars.

Junior-Prof. Dr. Angela Wittmann, U Mainz
und **Dr. Oleksandr Pylypovskiy**, Helmholtz-
Zentrum Dresden-Rossendorf