

Defects in Two-dimensional Materials

750. WE-Heraeus-Seminar

Der Spruch „Gott erschuf die Festkörper, aber der Teufel die Oberflächen“ stammt von Wolfgang Pauli. Damit wollte er die Komplexität des Problems kennzeichnen, das entsteht, wenn die perfekte Periodizität eines Kristalls unterbrochen wird – etwa, wenn man die Oberfläche einbezieht oder ein Defekt vorhanden ist. Was passiert jedoch, wenn ein Material quasi nur aus Oberflächen besteht, wie in einem 2D-System, und zusätzlich Defekte aufweist? Diesem Thema widmete sich dieses Seminar, das nach einer pandemiebedingten Verschiebung um zwei Jahre vom 8. bis 12. Mai im Physikzentrum Bad Honnef stattfand.

Wegen ihrer außergewöhnlichen Eigenschaften sind 2D-Materialien, wie Graphen, hexagonales Bornitrid oder Übergangsmetall-Dichalkogenide, in den Mittelpunkt der Grundlagen- bzw. der angewandten Forschung gerückt. Die Reichhaltigkeit des Forschungsgebietes zeigt sich in wiederholten Durchbrüchen in den letzten 15 Jahren, etwa der Entdeckung magnetischer 2D-Materialien oder von Supraleitung in verdrehten Bilagen-Graphen.

Aufgrund des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik ist bei endlichen Temperaturen immer mit einer gewissen Unordnung und somit Defekten zu rechnen. Da die meisten 2D-Materialien synthetisch hergestellt werden, kann ihre Defektkonzentration zudem viel höher sein als im thermodynamischen Gleichgewicht zu erwarten wäre. Gleichzeitig bestimmt die Defektkonzentration die elektrischen, optischen, thermischen und mechanischen Eigenschaften von 2D-Materialien maßgeblich.

Im Rahmen des Seminars haben führende Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler Defekte in 2D-Materialien diskutiert. Dabei war die Interaktion verschiedener Communities besonders fruchtbar. Experten der Materialwissenschaften und insbesondere der Synthese von 2D-Materialien sowie solche der Rastertunnel- und Transmissionsелеktronenmikroskopie konnten sich rege mit Expertinnen der theoretischen Physik und der computergestützten Materialwissenschaften austauschen. Dabei gelang es, die wichtigsten Herausforderungen dieses noch relativ neuen Gebietes zu identifizieren und zu diskutieren. Themen waren unter anderem die Erzeugung von Defekten durch energiereiche Elektronen, strukturelle Eigenschaften von Defekten, die magnetische Funktionalisierung von 2D-Materialien durch Einbau magnetischer Atome, die Eigenschaften tiefer Störstellen in halbleitenden 2D-Materialien, Defekte als Einzelphotonenemitter oder die Kopplung von Defektzuständen an die Unterlage des 2D-Materials. Promovierende und Nachwuchswissenschaftler:innen hatten dabei die Möglichkeit, sich mit den neuesten

Entwicklungen und Erkenntnissen auf dem Gebiet vertraut zu machen.

Unser Dank gilt der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die finanzielle Förderung und großartige Unterstützung bei der Organisation des Seminars sowie den Mitarbeitenden im Physikzentrum Bad Honnef für die hervorragende Betreuung.

Dr. Stefan Facsko, Dr. Arkady V. Krashennnikov, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, **Prof. Dr. Thomas Michely**, U Köln, **Prof. Dr. Marika Schleberger**, U Duisburg-Essen

Accelerated Discovery of New Materials

787. WE-Heraeus-Seminar

Die Entwicklung neuer Werkstoffe ist für alle Industriezweige von entscheidender Bedeutung, da sie praktisch alle technologischen Anwendungen berührt, etwa erneuerbare Energieerzeugung, effiziente Ressourcennutzung und Komponenten für die Informationstechnologie. Eine der größten Herausforderungen dabei ist die immense Anzahl möglicher Materialklassen, die weit über das hinausgeht, was sich jemals synthetisieren und charakterisieren lässt. Digitalisierungsstrategien für die Materialforschung, die fortschrittliche Computermethoden mit modernsten experimentellen Techniken verbinden, bieten einen schnelleren und effizienteren Weg und werden die Materialforschung radikal verändern.

Dieses Seminar brachte vom 15. bis 18. Mai rund 70 Forschende aller Karrierestufen und mit unterschiedlichem Hintergrund aus 40 Instituten in 12 Ländern zusammen. Der Aufenthalt im Physikzentrum Bad Honnef förderte den Austausch, da er allen die Möglichkeit bot, ihre Arbeit vorzustellen und in einem entspannten Rahmen zu diskutieren.

Die Themen der Vorträge und Poster umfassten aktuelle Anwendungen des maschinellen Lernens und anderer datengesteuerter Techniken in der Materialwissenschaft sowie die Veränderungen, die dieser neue Ansatz für das Fachgebiet mit sich bringt, z. B. eine verstärkte Konzentration auf die Datenerfassung und -verarbeitung.

Das Seminar begann mit einem Vortrag von Claudia Draxl über das Potenzial – und die bereits bestehenden Erfolge – von FAIR-Daten für die Materialforschung (FAIR = Findable, Accessible, Interoperable, Reusable). Ein weiterer Höhepunkt war der Vortrag von Berend Smit über Big Data in der Chemie und im Chemieingenieurwesen. Im Folgenden lag ein Schwerpunkt auf den beiden Materialklassen Hochentropie-Legierungen sowie „metal organic frameworks“.

Zusätzlich zu den 12 eingeladenen Vorträgen gab es 9 weitere Präsentationen und 37 Poster, die ein breites Themenspektrum abdeckten und die Bedeutung von Automatisierung, Hochdurchsatz-Screening,

Modellierung und Digitalisierung in der Materialwissenschaft, einschließlich Katalyse, erneuerbare Energien und elektronische Anwendungen, unterstrichen.

Ein für die meisten etwas unerwarteter Aspekt des Treffens war die Rolle, die große Sprachmodelle (LLMs) wie ChatGPT bereits spielen. Viele Teilnehmende haben bei diesem Seminar erstmals anhand mehrerer Beiträge gesehen, wie LLM-Modelle zur Entdeckung, Synthese und Optimierung neuer Materialien dienen können. Unser herzlicher Dank gilt der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung, der FAIRmat und dem Helmholtz-Programm „Materials Systems Engineering“ für die finanzielle und organisatorische Unterstützung sowie dem Physikzentrum Bad Honnef für die uns gewährte Gastfreundschaft.

Prof. Dr. Christof Wöll, KIT Karlsruhe, **Prof. Dr. Martin Aeschlimann**, U Kaiserslautern, **Prof. Dr. Roser Valenti**, U Frankfurt

Beyond Imperfections: New Structure-Property Relationships in Ceramics and Glasses

788. WE-Heraeus-Seminar

Lokale Unvollkommenheiten in Materialien wie Defekte, Verunreinigungen, Versetzungen, Domänenwände und Unordnung sind sowohl entscheidend für Anwendungen als auch von rein wissenschaftlichem Interesse, da sie oft erst wichtige Eigenschaften ermöglichen oder feinabstimmen, die in homogenen Medien nicht auftreten. In jüngster Zeit wurden in Materialien mit mikroskopischer Heterogenität mehrere exotische Phänomene entdeckt, was darauf hindeutet, dass die lokalen Unvollkommenheiten gemeinsam mit den Hostmatrizen einzigartige Funktionalitäten erlauben. Die verborgenen Mechanismen dahinter aufzuklären ist essenziell, um neuartige Funktionsmaterialien zu entwickeln.

Das Ziel dieses Seminars, das vom 22. bis 24. Mai im Physikzentrum stattfand, war es daher, grundlegende Aspekte in Bezug auf Strukturen und Funktionalitäten erweiterter Unvollkommenheiten in Kristallen und Gläsern – die seit Kurzem auch „hypergeordnete Strukturen“ (hyperordered structures) genannt werden – zu vertiefen und neue Forschungsrichtungen zu erkunden. Zudem bot das Seminar eine Plattform für internationale und interdisziplinäre Kommunikation, um die Zusammenarbeit zwischen jungen und erfahrenen Forschenden zu fördern.

Die renommierten Referentinnen und Referenten präsentierten einen umfassenden Blick auf das Zusammenspiel zwischen der Struktur von Materialien auf verschiedenen Ebenen und ihren makroskopischen Eigenschaften und darauf, wie dieses Wissen bei der Entwicklung von Funktionalitäten für neuartige Materialien hilft. Die behandelten