

Physikalische Chemie: Neue magnetische Materialklasse entdeckt

Wissenschaft

Bernadette Ralsler (Redaktion) am 7. August 2009

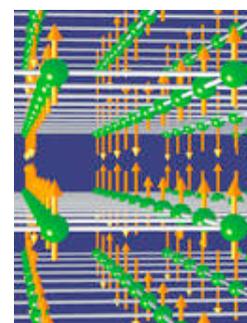
Gleich im ersten Band von "Nature Chemistry" mit einer Publikation vertreten zu sein, ist für Raimund Podloucky vom Institut für Physikalische Chemie eine Ehre: In der August-Ausgabe des neuen Journals der renommierten Nature Publishing Group veröffentlichte der Materialwissenschaftler gemeinsam mit Kollegen aus China, Japan und den USA unerwartete Ergebnisse bei der Untersuchung einer Strontium-Eisen-Oxid-Verbindung (SrFeO_2). Dem internationalen Team ist es erstmals gelungen, in einer schichtförmigen Struktur magnetische Phasenübergänge zu erzeugen.

Schichtförmige Metall-Sauerstoff-Verbindungen wie Strontium-Eisen-Oxid (SrFeO_2) sind für MaterialwissenschaftlerInnen ganz besonders interessant: Ihre makroskopischen Eigenschaften - z. B. Magnetismus, Leitfähigkeit, chemische Bindung, etc. - sind eine unmittelbare Erscheinungsform von Quanteneffekten. Kürzlich gelang es einem internationalen Forscherteam unter Beteiligung der Universität Wien in diesem Zusammenhang, ein bisher unbekanntes Quantenphänomen zu beschreiben und im Journal "Nature Chemistry" zu veröffentlichen.

Neue Materialklasse



Der Materialwissenschaftler Raimund Podloucky ist Mit-Autor einer aufsehenerregenden Publikation in der aktuellen "Nature Chemistry"-Ausgabe.



Die Schichtstruktur-Verbindung SrFeO_2 zeigt unter Druck einen Übergang von

Arbeitsgruppe Komputative Physikalische Chemie und Polymerchemie am

Institut für Physikalische Chemie an der Fakultät für Chemie

Nature Chemistry

Artikel "Spin transition in a four-coordinate iron oxide"

in "Nature Chemistry" (Band 1, Nr. 5)

VASP Group

Artikel: "Wissenschaftliche Software VASP findet weltweit Verbreitung"

Das Ergebnis, das im Artikel "Spin transition in a four-coordinate iron oxide" beschrieben wird, war für die Forscher eine Überraschung: "Wir haben festgestellt, dass sich bei zweidimensionalen Schichtstrukturverbindungen wie SrFeO_2 die magnetischen Eigenschaften abrupt verändern, wenn man sie 'gehörig unter Druck' setzt", erklärt Raimund Podloucky von der Arbeitsgruppe Komputative Physikalische Chemie und Polymerchemie am Institut für Physikalische Chemie, einer der drei Theoretiker und einziger Österreicher im 18-köpfigen Autorenteam.

Bei Normaldruck sind die Eisenatome von SrFeO_2 in einem hochmagnetischen Zustand, wobei sie sich in Eisen-Sauerstoff-Schichten befinden, in denen die Eisenatome jeweils vier Sauerstoffatome als nächste Nachbarn haben. "Bei hohem Druck verringert sich schlagartig der Magnetismus der Eisenatome in einer solchen zweidimensionalen Schichtstruktur, was bisher nur für dreidimensionale Kristallstrukturen bekannt war", so der Materialwissenschaftler.

Dieser "magnetische Phasenübergang" wird von einer sehr eigenartigen Änderung der elektrischen Leitfähigkeit begleitet: SrFeO_2 wird bei hohem Druck zu einem sogenannten "halbmetallischen Ferromagneten". Daraus schließen die Wissenschaftler, dass diese Verbindung eine neue, bisher unbekannte Klasse magnetischer und elektronischer Materialien vertritt, die z. B. für Chiptechnologien sehr interessant sein könnte.

Moderne Materialwissenschaft

Dieses Ergebnis ist in zweierlei Hinsicht besonders:

Zum einen wurden magnetische Phasenübergänge bis dato nur in dreidimensionalen Modellen beobachtet. Zum anderen kam es in enger Zusammenarbeit zwischen theoretischer und experimenteller Materialwissenschaft zustande. So konnte der beschriebene Effekt nicht nur gemessen, sondern auch am Computer modelliert und verstanden werden. "In unserer Wissenschaftsbranche finden Experiment und Theorie immer enger zusammen, um der Natur auf die Schliche zu kommen", beschreibt der Wissenschaftler die Entwicklung der modernen Materialwissenschaften - und sein Erfolgsrezept.

Dabei ist die Methodik, mit der Podloucky seine theoretischen Berechnungen für die gemeinsame Veröffentlichung durchgeführt hat, eine weitere wichtige Zutat: Das Programm VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) wurde - im selben Gebäude in der Sensengasse, in dem sich auch Podlouckys Institut befindet - vom Physiker Georg Kresse und seinen MitarbeiterInnen von der Gruppe Computergestützte Materialphysik entwickelt. "VASP ist die weltweit erfolgreichste Methode zur Lösung der Schrödingergleichung von fester Materie. Das Programm ermöglicht es, die quantenphysikalischen Wechselwirkungen in kondensierter Materie parameterfrei zu berechnen", sagt der Chemiker, der seinen "KollegInnen im 2. und 3. Stock" dafür gleich doppelt dankbar ist: "Wir bekommen immer die neuesten Versionen von VASP zur Verfügung gestellt - auch jene, die noch gar nicht öffentlich zugänglich sind, was für die aktuelle Publikation sehr wichtig war."

Stolzer Doktorvater

Die Veröffentlichung im renommierten "Nature"-Journal freut Raimund Podloucky aber auch noch in

anderer, ganz persönlicher Hinsicht: Einer der Mit-Autoren - Xing-Qiu Chen vom Oak Ridge National Laboratory (Tennessee, USA) - hat seine wissenschaftliche Karriere hier bei ihm am Institut für Physikalische Chemie begonnen: "Er ist sozusagen mein Schüler, und nicht zuletzt aufgrund dieser Publikation bekommt er nun eine Super-Professur in China", ist Chens ehemaliger Doktorvater stolz. (br)

Der Artikel "Spin transition in a four-coordinate iron oxide" erschien in der [aktuellen Ausgabe](#) des Journals "Nature Chemistry" (August 2009, Band 1, Nr. 5, S. 371-376). Er ist seit 20. Juli 2009 [online](#) zugänglich.

[Impressum](#)

Universität Wien | Dr.-Karl-Lueger-Ring 1 | 1010 Wien | T +43-1-4277-0