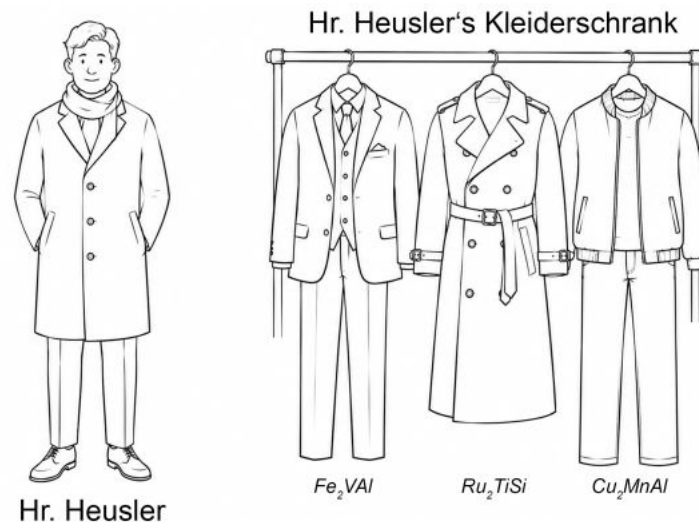


Atomic Outfittery: Maßgeschneiderte Materialien

13.05.2026, 08:40 | Wissenschaft, Forschung, Bildung

Pressemitteilung von: *idw - Informationsdienst Wissenschaft*



Viele Schlüsselinnovationen unserer Zeit, wie leistungsfähige Elektromotoren, langlebige Werkstoffe bis hin zu Quantencomputern, beruhen auf Materialien mit maßgeschneiderten Eigenschaften. Erzeugen lassen sie sich zum Beispiel durch Dotierung oder Legierung, wobei einzelne Atome im Kristallgitter durch andere ersetzt werden. Wie genau sich die thermoelektrischen Eigenschaften eines Materials durch gezielte Substitution verbessern lassen, untersuchte ein Team um Andrej Pustogow und Ernst Bauer von der TU Wien. Die Ergebnisse veröffentlichten sie kürzlich in der renommierten Fachzeitschrift *Nature Communications*.

Heusler-Verbindungen rücken in den Fokus

Im Mittelpunkt der Forschung steht die Materialklasse der „Heusler“-Verbindungen. Diese zeichnen sich durch ihre große strukturelle Variabilität aus: Viele verschiedene Elemente können in ihr Kristallgitter eingebaut werden, wodurch sich ihre Eigenschaften in weiten Bereichen modifizieren lassen. „Genau diese Vielseitigkeit macht Heusler-Verbindungen zu einem idealen ‚Baukasten‘ für neue funktionale Materialien,“ erklärt Ernst Bauer.

„Man kann sich die Modifikationen wie einen Outfitwechsel vorstellen“, sagt Andrej Pustogow. „Innendrin steckt immer dieselbe Person. Was sich aber, je nach Anlass oder Funktion ändert, ist das Outfit.“ Übertragen auf die Materialforschung bedeutet dies, dass zwar alle dazugehörigen Materialien dieselbe Kristallstruktur haben, man jedoch nach Belieben die Atome austauschen und damit Funktionalität ‚on demand‘ erhalten kann.

Neue thermoelektrische Materialien

Ein besonders vielversprechendes Anwendungsfeld von Heusler-Verbindungen ist die Thermoelektrik. Thermoelektrische Prozesse sind solche, bei denen Wärme direkt in elektrische Energie umgewandelt wird. Entsprechende Materialien könnten beispielsweise Abwärme aus Industrieprozessen oder Fahrzeugen nutzen und so zu einer Steigerung der Energieeffizienz beitragen. Umgekehrt lassen sich Thermoelektrika durch elektrischen Strom auch zum Kühlen einsetzen, etwa in kompakten Kühlschränken oder in PCR-Geräten, die schnelle Temperaturwechsel benötigen.

„In beiden Fällen sucht man für eine hohe thermoelektrische Effizienz Materialien, die gleichzeitig eine gute elektrische

Leitfähigkeit und eine geringe Wärmeleitfähigkeit besitzen. In unserer aktuellen Arbeit haben wir eine Methode gefunden, um Hindernisse für den Wärmestrom zu erzeugen, die für die elektrischen Ladungsträger unsichtbar sind,“ erklärt Fabian Garmroudi, einer der beiden Erstautoren der Studie. Illia Serhiienko, ebenfalls Erstautor, fügt hinzu: „Somit haben wir mit der höchsten jemals gemessenen thermoelektrischen Performance in Heusler-Materialien einen neuen Rekord erreicht – und wir sind noch lange nicht am Limit!“

Kein Stein bleibt auf dem anderen

Die Wirkung solcher atomaren Veränderungen, wie das Team sie durch Dotierung oder Legierung vornimmt, kann dabei enorm sein und ist in vielen Bereichen unseres Alltags sichtbar. „Wir haben im wahrsten Sinne des Wortes keinen (elementaren Bau-)Stein auf dem anderen gelassen. Ausgehend von der intensiv untersuchten Verbindung Fe₂VAl haben wir die Eisen-Atome durch Ruthenium ersetzt, Vanadium durch Titan und Aluminium durch Silizium,“ sagt Andrej Pustogow. Das Resultat: Ru₂TiSi, ein Material mit stark verbesserter thermoelektrischer Performance. Ersetzt man in Fe₂VAl stattdessen alle Eisen-Atome mit Vanadium erhält man in V₃Al einen konstanteren Widerstand als im vielzitierten Material Konstantan. Der entscheidende Fortschritt liegt dabei nicht nur in der verbesserten Leistung, sondern vor allem im Verständnis der zugrundeliegenden physikalischen Mechanismen, die auch auf andere Materialien übertragbar sind.

Neue Materialklassen erobern die „Garderobe“

Das Team um Andrej Pustogow erforscht auch abseits der halbleitenden Heusler-Verbindungen neue Wege, um die thermoelektrischen Eigenschaften von Materialien zu verbessern. Mit der Einführung einer neuen Materialklasse, der metallischen Thermoelektrika, fügt das Team dem Forschungsfeld – um beim Outfit-Vergleich zu bleiben – nicht nur einen weiteren Kleiderschrank, sondern gleich eine ganze Einkaufsstraße hinzu. Die Vergabe eines ERC Grants unterstreicht die Relevanz des Forschungsfelds.

wissenschaftliche Ansprechpartner:

Prof. Andrej Pustogow
Technische Universität Wien
Forschungsbereich Functional and Magnetic Materials
+43 1 58801 131 28
andrej.pustogow@tuwien.ac.at

Prof. Ernst Bauer
Technische Universität Wien
Forschungsbereich Functional and Magnetic Materials
+43 1 58801 131 44
ernst.bauer@tuwien.ac.at

Originalpublikation:

Garmroudi, F., Serhiienko, I., Parzer, M., Pustogow, A., Podloucky, R., Mori, T., & Bauer, E. (2026). Orbital-selective band engineering realizes high zT in p-type Ru₂Ti_{1-x}HfxSi full-Heusler thermoelectrics. *Nature Communications*, 17(1), 2878.

Garmroudi, F., Parzer, M., Mori, T., Pustogow, A., & Bauer, E. (2025). Thermoelectric Transport in Ru₂TiSi Full-Heusler Compounds. *PRX Energy*, 4(1), 013010.

Parzer, M., Garmroudi, F., Riss, A., Mori, T., Pustogow, A., & Bauer, E. (2025). Mapping delocalization of impurity bands across archetypal mott-Anderson transition. *Physical Review Letters*, 135(6), 066302.

Technische Universität Wien

SarahLink (Mitarbeiter in der Presse- und Öffentlichkeitsarbeit)

43 664 605882412

sarah.link@tuwien.ac.at

News-ID: 1311871 • Views: 141 (Stand: 02.07.2026)

Link zur Pressemitteilung:

<https://www.openpr.de/news/1311871/Atomic-Outfittery-Massgeschneiderte-Materialien-idw.html>