

Molekül in der Klemme

Mit einem filigranen Versuchsaufbau konnten Physiker und Chemiker aus Karlsruhe den Stromfluss durch ein einzelnes Molekül messen.

Die jüngsten Fortschritte der Nanotechnologie lassen hoffen, dass elektronische Schaltkreise von der derzeitigen (sub-)Mikrometer-Längenskala auf die Größe einzelner Atome oder Moleküle geschrumpft werden können. Zuvor müssen jedoch viele grundlegende Fragen ge-

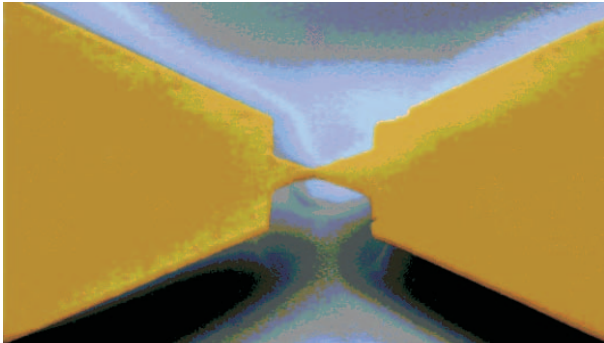


Abb. 1: Elektronenmikroskopische Aufnahme einer Elektrodenstruktur aus Gold (gelb) auf einer isolierenden Schicht aus Polyimid (blau). Die Einschnürung der freitragenden Brücke hat vor dem Brechen Abmessungen von etwa $50 \times 50 \text{ nm}^2$.

klärt werden: Welche Bausteine eignen sich als Grundelemente für elektronische Nano-Schaltungen? Wie lassen sich diese Bausteine reproduzierbar und effizient kontaktieren und ansteuern? Und wie kommt überhaupt der elektronische Transport auf der Submikrometerskala zustande? Vor allem die letzte Frage beschäftigt die Physikerinnen und Physiker seit einigen Jahren. Sie versuchen, einen Strom durch einzelne Atome- oder Moleküle zu schicken und die charakteristischen Kennlinien zu interpretieren. Einer Arbeitsgruppe aus Physikern und Chemikern vom Forschungszentrum Karlsruhe ist es nun gelungen, ein einzelnes aromatisches Molekül zwischen zwei Elektroden einzuklammern und mit einem Strom zu beschicken [1]. Die Arbeit zeigt, dass bereits dieses konzeptionell einfache Experiment sehr komplex ist, denn der direkte Nachweis, dass es sich um den gewünschten Schaltkreis – genau ein Molekül zwischen zwei Elektroden – handelt, ist keineswegs trivial.

J. Reichert und seine Mitarbeiter haben Moleküle mit Hilfe von mechanisch kontrollierten Bruchkontakten buchstäblich „in die Zange genommen“, und zwar mit einer ähnlichen Technik wie in den richtungweisenden Arbeiten von Reed et al. und Kergueris et al. [2]. Durch einige Änderungen in der Versuchsdurchführung des Experi-

ments gelang es ihnen, ein und dasselbe Molekül mit beiden Elektroden zu kontaktieren.

Hierzu werden lithographisch hergestellte freitragende Nanobrücken aus Gold so lange gedehnt, bis sie brechen und ein Spalt von wenigen Nanometer Breite entsteht (Abb. 1). Auf die offene Brücke wird ein Tropfen aus den zu untersuchenden Molekülen und einem geeigneten Lösemittel aufgetragen. Die Moleküle sind mit Endgruppen versehen, die eine gute chemische Bindung zum Elektrodenmaterial eingehen. Nachdem das Lösemittel verdampft ist, wird im Vakuum die Spaltbreite so lange reduziert, bis ein nahezu abstandsunabhängiger, nicht fluktuierender Widerstand des Schaltkreises erreicht wird. In diesem Fall, so vermuten die Autoren, geht das bisher offene Ende eines ersten Moleküls eine chemische Bindung mit der Gegenelektrode ein. Bei weiterer Annäherung treten Stufen im Widerstand auf, die als Kontaktbildung weiterer Moleküle interpretiert werden können [3].

Doch wie lässt sich sicherstellen, dass es sich um chemisch an beiden Seiten gebundene Moleküle handelt (und nicht etwa um Tunneleffekte zwischen mehreren Molekülen)? Und wie kann die Anzahl der am Transport beteiligten Moleküle bestimmt werden? Die Beantwortung dieser Fragen wird dadurch erschwert, dass man die Ankopplung der Moleküle nicht genau genug kontrollieren kann, um auf atomarer Skala die gleiche Anordnung ein zweites Mal herzustellen.

Hier kommt ein weiterer wesentlicher Fortschritt des Karlsruher Experiments zum Tragen: In einer Kollaboration von Chemikern und Physikern wurden Moleküle aus Ketten von aromatischen Ringen gezielt für dieses Experiment synthetisiert. Mit ihnen lassen sich typische Verhal-

tensweisen aufdecken, die von der exakten atomaren Ankopplung unabhängig sind. Zum Beispiel wurden gezielt symmetrische oder unsymmetrische Seitengruppen angebaut, denn solche Moleküle können Aufschluss darüber geben, wie die räumliche Symmetrie und die elektronische Struktur des Moleküls sich in den Transporteigenschaften widerspiegeln. Um dies herauszufinden, haben Reichert et al. Strom-Spannungskennlinien aufgenommen und nach Symmetrien bzw. Asymmetrien durchforstet.

Sie beobachteten reproduzierbare Strom-Spannungskennlinien mit charakteristischen Nichtlinearitäten, die sie als Transport durch bestimmte Molekülorbitale interpretieren. Diese Beobachtung unterstützt die Vermutung, dass es sich im ersten „eingerasteten“ Zustand um ein beiderseits chemisch gebundenes Molekül handelt. Ein solcher Schaltkreis bleibt jedoch nicht für alle Zeiten konstant, sondern kann wieder instabil werden. Durch Nachregeln des Elektrodenabstands lässt sich nun wieder ein stabiler Zustand erreichen, der Ähnlichkeiten mit den zuvor beobachteten aufweist und Unterschiede, die von der unterschiedlichen Ankopplung verursacht werden. Die Kontakte mit asymmetrischen Molekülen zeigen außerdem Asymmetrien in den Kennlinien, die von Probe zu Probe ihre Polarität, nicht aber ihre charakteristische Struktur ändern – ein weiteres Indiz für den Einfluss eines einzelnen Moleküls und dessen statistischer Anordnung in den Elektroden (siehe Abb. 2).

Durch diese kriminalistische Analyse gelang schließlich der Indizienbeweis, dass – im Gegensatz zu den früheren Arbeiten – die am Transport beteiligten Moleküle tatsächlich an beiden Elektroden chemisch gebunden sind [4] und es

Prof. Dr. Elke Scheer, Fachbereich Physik, Universität Konstanz, 78457 Konstanz

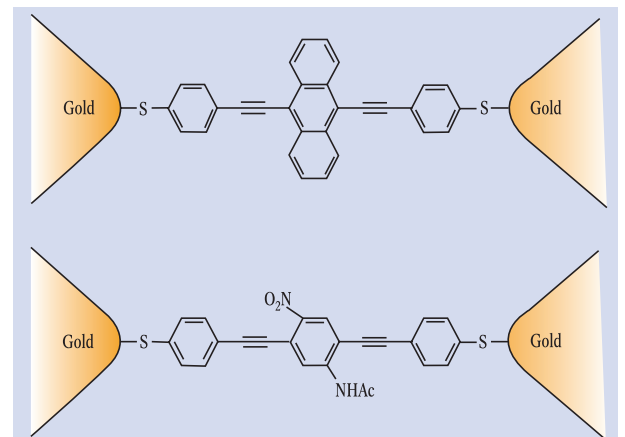


Abb. 2: Prinzip des Experiments: Ein räumlich symmetrisches (oben) bzw. asymmetrisches (unten) konjugiertes Molekül ist über Schwefelatome an Goldelektroden gebunden.

sich sehr wahrscheinlich dabei um ein einzelnes Molekül handelt. Gewissheit darüber wird man jedoch erst erhalten, wenn die Details der Kennlinien quantitativ verstanden sind und mit der elektronischen Struktur der Moleküle erklärbar sind. Hierzu sind detaillierte quantenchemische Rechnungen nötig, die sowohl die Struktur der Moleküle als auch die Elektroden und deren chemische Ankopplung korrekt beschreiben. Die hier verwendeten Moleküle sind jedoch noch überschaubar genug, um quantitative theoretische Vorhersagen möglich zu machen. Daher besteht die Hoffnung, die komplexe Struktur der Kennlinien in absehbarer Zukunft zu verstehen und Vorhersagen für weitere Moleküle machen zu können.

Ohne begleitende Rechnungen scheint es aussichtslos, allein durch systematische Experimente die Molekülklasse zu finden, die die oben genannten Anforderungen an eine zukünftige Nanoelektronik erfüllt. Zu groß ist die Anzahl der bereits diskutierten Systeme, zu umfangreich die Parameterräume, zu langwierig jedes einzelne Experiment.

Ein wichtiger Schritt besteht darin, zunächst die „Drosophila“ der molekularen Elektronik zu finden, also ein System aus Elektrodenmaterial und Molekül, das man quantitativ versteht, auch wenn es noch nicht alle Möglichkeiten der Anwendung eröffnet. Wenn dies gelungen ist, kann man gezielt nach einer geeigneten Molekülklasse suchen.

Ob die zukünftige Elektronik eine molekulare sein wird, und falls ja, welche Substanzklasse sich schließlich durchsetzen wird, hängt nicht zuletzt davon ab, was wirtschaftlich rentabel ist. Das lässt sich an der hartnäckigen Dominanz siliziumbasierter Schaltkreise erkennen, die längst nicht mehr die schnellsten, kleinsten, besten sind. Hierzu ist intensive interdisziplinäre Zusammenarbeit erforderlich, wie sie im Experiment von Reichert et al. beispielhaft geleistet wurde.

ELKE SCHEER

- [1] J. Reichert et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 176804 (2002)
- [2] M. A. Reed et al., Science **278**, 252 (1997); C. Kergueris et al., Phys. Rev. B **59**, 12505 (1999)
- [3] J. Reichert, persönliche Mitteilung
- [4] E. G. Emberly und G. Kirczenow, Phys. Rev. B **64**, 235412 (2001), J. Heurich et al., cond-mat/0110147

Alles Blasen, oder was?

Kernfusion aus akustischer Kavitation?

Anfang März kündigte sich mal wieder Revolutionäres an. Zunächst gab es nur Vorinformationen auf der Internetseite von Science mit Hinweisen auf eine Veröffentlichung am 8. März, dann aber standen bereits eine Woche davor Vorabdrucke mehrerer Artikel aus diesem Heft im Internet: Kernfusion sollte ohne die aufwändigen Apparaturen der Plasmaphysiker gelungen sein! Diesmal allerdings nicht in einer Elektrolysezelle wie 1989 bei der „Kalten Fusion“, sondern in Gasblasen, die durch akustische Wellen angeregt werden [1].

Dass in Flüssigkeiten Gasblasen entstehen können, ist als Kavitation bekannt und wurde seit den dreißiger Jahren des vergangenen Jahrhunderts insbesondere im Zusammenhang mit den Vorgängen an Schiffspropellern untersucht. Dabei beobachtete man bereits, dass diese Blasen durch Schallwellen angeregt werden können und bei ihrer dynamischen Ausdehnung bzw. beim Kollaps sogar leuchten (Sonolumineszenz). Inzwischen ist der Mechanismus dieses Phänomens geklärt [2]: Die Blase wird beim Kollaps adiabatisch komprimiert und erhitzt sich dadurch auf hohe Temperaturen im Bereich einiger 10 000 K, womit die Anregung der Atome oder Moleküle in der Gasblase möglich wird. Um allerdings Fusionsreaktionen zu erzeugen, sind wesentlich höhere Temperaturen im Bereich einiger 100 Millionen K notwendig, und solche Werte wurden in bisherigen Experimenten zur Sonolumineszenz nie beobachtet. Alle konsistenten Modelle ergeben Temperaturen bis zu etwa 15000 K (d. h. 1,4 eV).

Nun aber kam die Veröffentlichung aus dem Oak Ridge National Laboratory in Tennessee: In einem Becherglas mit Azeton, in dem der Wasserstoff durch das schwerere Deuterium ersetzt wurde, wurden durch die Einstrahlung von Neutronen hoher Energie (14-MeV-Neutronen aus der Deuterium-Tritium-Reaktion) Gasblasen erzeugt, die einem Ultraschallfeld ausgesetzt wurden. Darin expandierten und kollabierten die Blasen, und nach einigen Stunden dieses Betriebes fanden die Autoren in der Acetonlösung einen erhöhten