

Stemmingsfoto fra Kasper Nørgaards laboratorium, hvor studerende arbejder med forskellige aspekter af molekylær elektronik.

Foto: Kasper Nørgaard



Foto: Kasper Nørgaard

# PÅ VEJ MOD ORGANISKE COMPUTERCHIPS

## Forfatter

Carsten R. Kjær  
Aktuel Naturvidenskab  
crk@aktuelnaturvidenskab.dk



**DANMARKS FRIE FORSKNINGSFOND**  
INDEPENDENT RESEARCH FUND DENMARK

Artiklen er sponsoreret af Danmarks Frie Forskningsfond | Natur og Univers.

Danmarks Frie Forskningsfond dækker alle videnskabelige hovedområder og uddeler hvert år godt 1 mia. kr. til forskningsprojekter baseret på forskernes egne ideer. Danmarks Frie Forskningsfond består af 84 anerkendte forskere udpeget på baggrund af deres høje faglige kompetence. Formand for Danmarks Frie Forskningsfond | Natur og Univers er professor ved Aarhus Universitet, Lars Arge. Læs mere på [www.dff.dk](http://www.dff.dk)

Hvis man kan erstatte silicium med organiske molekyler i computerchips, vil det bane vejen for langt mere fleksible og miljøvenlige chips. Det kræver, at man populært sagt kan sætte ledninger på de organiske molekyler. Den videnskabelige "nød" vil Kasper Nørgaard og kolleger gerne knække.

**K**unsten at samle og forbinde molekyler til simple kredsløb blev tilbage i år 2001 udnævnt til årets videnskabelige gennembrud af tidsskriftet *Science*. Siden har forskere verden over arbejdet intenst på at udfolde de lovende perspektiver i det, man kalder for "molekylær elektronik". Umiddelbart kan man se molekylær elektronik som den ultimative minituarisering af elektroniske apparater, idet for eksempel ledninger og elektroder i de mindste kredsløb,

man kan forestille sig, vil bestå af enkelte molekyler.

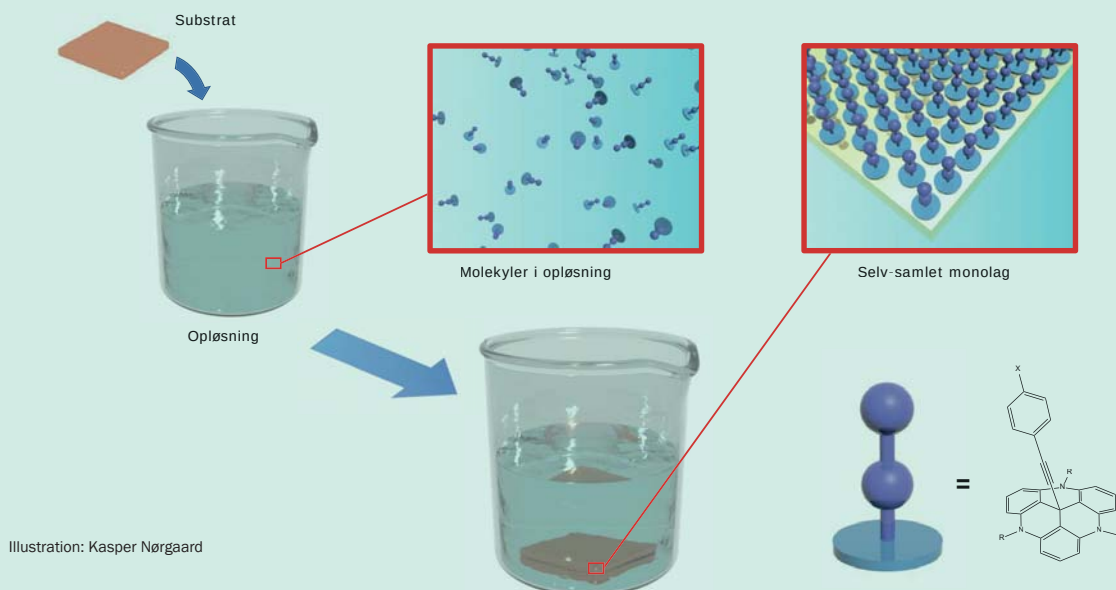
»Men det er nu ikke kun størrelsen, det kommer an på,« fortæller Kasper Nørgaard, som er lektor ved Kemisk Institut og Nano-Science Centret ved Københavns Universitet. »I virkeligheden er det nok mere interessant, at vi ved at bygge molekylære komponenter op fra bunden med organiske molekyler vil åbne op for en hel verden af muligheder, hvor næsten kun fantasien sætter grænser.«

## Uendelige variationsmuligheder

Kasper illustrerer sin pointe med udviklingen af processorer til computere. Siden opfindelsen af det integrerede kredsløb i 1958 er antallet af transistorer, det har været muligt at presse sammen på det samme areal på en chip, blevet fordoblet cirka hvert andet år. Denne udvikling, som er kendt som *Moore's lov*, er baggrunden for, at computers ydeevne er vokset så voldsomt, idet antallet af transistorer på processorerne bestemmer deres ydeevne.



## De organiske molekyler i den molekylære chip



De funktionelle organiske molekyler i forskernes molekylære chip har karakter af såkaldte selv-samlende monolag. At de er selv-samlende betyder, at de dannes spontant fra en opløsning ved adsorbering på en overflade (i molekylær elektronik vil denne overflade typisk være af guld). Her organiserer molekylerne sig i mere eller mindre velordnede domæner i et enkelt lag.

Kasper Nørgaard og kolleger arbejder i projektet med et molekyle kaldet triazatriangulen (nederst til højre), som glimrer ved at have form som et kurvet

ringsystem. Denne fungerer som en platform, hvorpå der kan hæftes andre molekyler (i det viste eksempel er det en kort ledning i form af ethylen-phenylen). Fordelen ved denne TATA-platform, som den kaldes, er dens geometri og store "fodaftrek" på underlaget som for eksempel giver god rumlig plads til, at molekyler, der hæftes på platformen, kan ændre form. På nuværende tidspunkt er TATA-platformens binding til guld ikke stærk nok til, at længere molekyler kan bindes til den. Derfor vil forskerne i det nye projekt søge at udvikle nye varianter af molekylet, der binder stærkere til guld.

»Man har længe vist, at der vil være en teoretisk grænse for, hvor langt man kan nå med traditionel teknologi, hvor man med litografiske teknikker skærer og ætser de elektriske kredsløb ud af enkelt stykke silicium,« siger Kasper. »I dag er man imidlertid i stand til med traditionel teknologi at lave de mindste kommercielle siliciumbaserede kredsløb i en størrelse på kun 10 nanometer, og næste generations "7-nanometer teknologi" er allerede på trapperne. Selvom et kredsløb baseret på molekylær elektronik stadig vil være en del mindre (2-3 nm), så vil der kun være en begrænset gevinst ved at erstatte silicium-baseret teknologi med ny molekylær elektronik, hvis man alene kigger på størrelsen i forhold til ydelsen.«

Til gengæld vil man med molekylær elektronik kunne bygge chips, der er langt mere fleksible end nutidens siliciumchips.

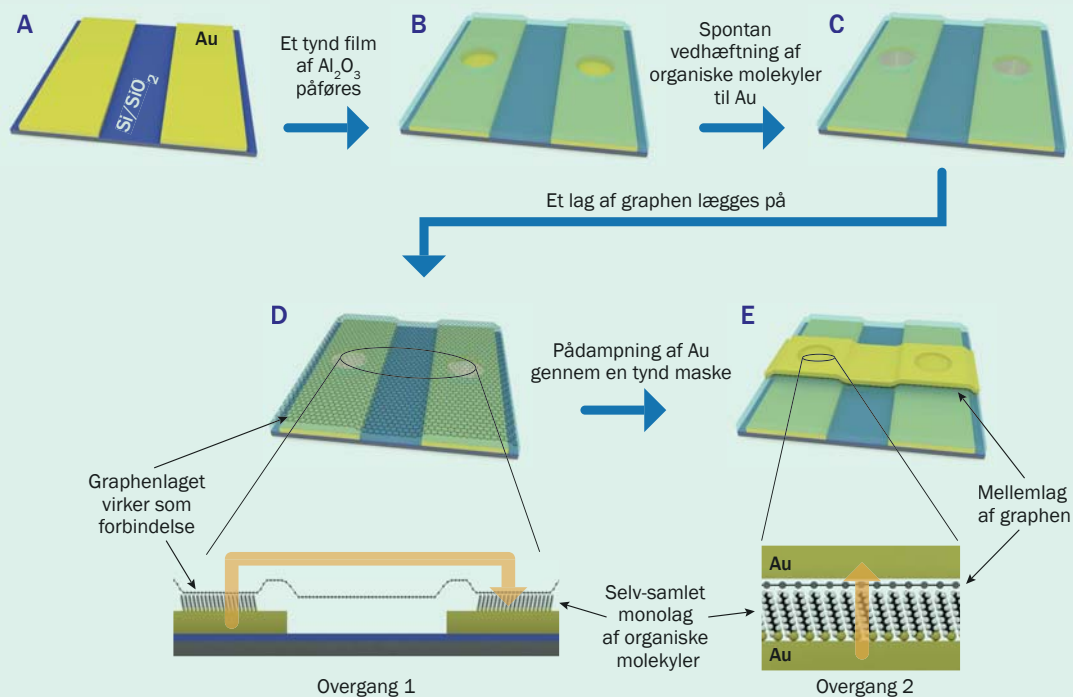
»I siliciumchips har man basalt set kun to parametre at skrue på for at variere på komponenternes egenskaber – nemlig størrelsen og graden af "doping", altså at man inducerer forureninger af andre grundstoffer i siliciums krystalgitter. Til sammenligning kan man i den molekylære elektronik variere chippens egenskaber ved at benytte forskellige organiske molekyler i de elektriske kredsløb. Og med omkring 10 millioner kendte organiske molekyler har man i praksis uendeligt mange muligheder for at fin-tune egenskaberne af sine elektroniske "devices",« siger Kasper. »For i en molekylær chip behøver

molekylerne ikke nødvendigvis bare opføre sig som små ledninger. Visse molekyler kan nemlig designes til at virke som elektriske komponenter som ensrettere eller kontakter, hvor strømmen populært sagt kan tændes og slukkes efter behov. På den måde kan de danne basis for avancerede elektriske kredsløb, hvor molekylernes funktion allerede er tænkt ind i syntesedesignet.«

### Kontakter med udfordringer

Organiske molekyler har for længst holdt deres indtog i kommercielle elektroniske apparater som solceller og lysemitterende dioder (OLED) brugt i fladskærme, hvor det er molekylernes optiske egenskaber (det vil sige farve og evne til at absorbere eller udsende lys), der udnyttes. Men endnu har vi altså ikke set organiske molekyler i kom-

## Sådan laver forskerne deres chip



Figuren viser de forskellige trin i fremstillingen af den molekylære chip, som Kasper Nørgaard og kolleger arbejder med. Først lægges bundelektroder af guld på en tynd plade af silicium. For at sikre, at der kun kan løbe strøm, netop hvor forskerne gerne vil have det, deponeres et isolerende lag af aluminiumoxid ovenpå guld, og i dette ætzes små huller, så der kun er kontakt til guld, der herigennem. Hele chippen puttes nu ned i en opløsning af organiske molekyler, hvor de organiske molekyler spontant hæfter sig på guld i bunden af de små brønde i et enkelt lag. Herefter lægges et lag graphen ovenpå herligheden, hvilket betyder at der nu er skabt elektrisk kontakt mellem molekylerne i de

to brønde. Forskerne kan nu måle på de elektroniske egenskaber af de organiske molekyler i brøndene i en situation, hvor strømmen løber gennem molekylerne to gange (overgang 1).

Et sidste skridt er at dampe guld ovenpå laget af graphen. Før i tiden ville det have ødelagt funktionen af de organiske molekyler i brøndene, men i dette design af chippen virker graphen også som et beskyttende lag, så en topelektrode af guld kan påføres, uden at det går ud over de organiske molekylers funktion. Når der er påført en guldelektrode, kan forskerne måle strømmen, der går gennem molekylerne fra bund- til topelektroden (overgang 2).

mercielle computerchips. Står det til Kasper Nørgaard og hans kolleger, vil det dog kun være et spørgsmål om tid.

I molekylær elektronik er det molekylernes elektriske egenskaber, det vil sige deres evne til at transportere elektroner, der er fokus på. En af de helt store udfordringer, når man vil undersøge de elektriske egenskaber af organiske molekyler, er, at det er meget svært at sætte en ledning på et enkelt molekyle. Og hvis man kun kigger på en opstilling med blot et enkelt molekyle ad gangen, der sættes en ledning til, bliver beskrivelsen

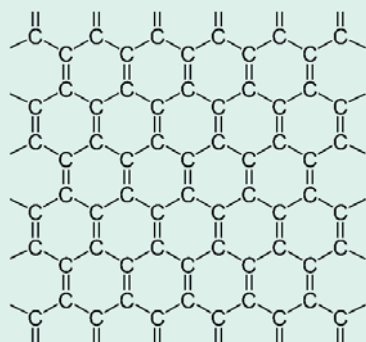
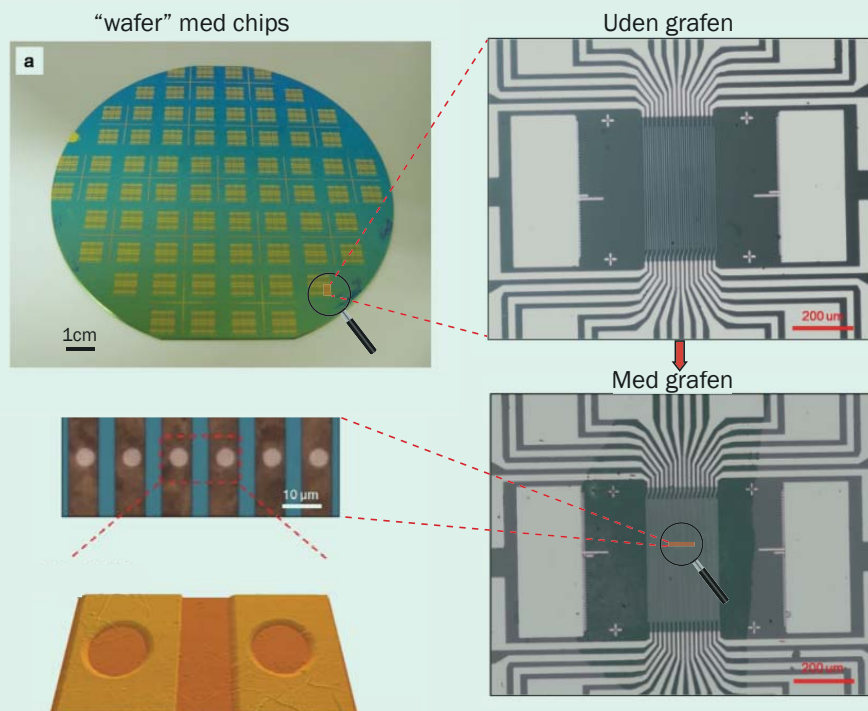
af, hvad der foregår en statistisk øvelse, der kræver tusindvis af målinger. »Rent grundvidenskabeligt er dette spor med at kontakte et enkelt molekyle interessant at følge. Men for at komme tættere på teknologisk anvendelse, kigger vi nu i stedet på såkaldte monolag – det vil sige selvsamlede lag af organiske molekyler, der kun er et enkelt molekyle tykke, og som er klemte inde mellem to elektroder,« siger Kasper. »Fordelen ved det er, at man kan lave rigtige devices – altså permanente funktionelle enheder, som man populært sagt kan stille op på hyl- den og tage ned igen et år efter og

måle nøjagtigt det samme. Samtidig vil funktionen af en sådan device stadig være knyttet tæt til, hvad der foregår på molekyleskalaen.«

Kasper fortæller, at man længe har haft kig på disse selvsamlende monolag (forkortet SAM efter det engelske Self-Assembled Monolayers) til funktionelle enheder. I første omgang lavede man sådanne enheder ved at hæfte molekylerne til en guldoverflade, der fungerede som den ene elektrode og derefter dampe guld ovenpå igen som topelektrode. Det har dog vist sig, at denne fremgangsmåde påvirker de

## Chip med graphen

Øverst til venstre ses en tynd silicium skive – en såkaldt wafer – med 72 felter, der hver indeholder 6 af forskernes chips. Til højre ses et mikroskopfoto af en enkelt af disse chips (øverst), som påføres en topelektrode af graphen (nederst). Laget af graphen er kun et atomlag af kulstof tykt, og derfor ser man kun forskellen på de to chips som en ganske svag mørkfarvning af chippen med graphen-laget. Nederst til venstre er vist den grundlæggende enhed i chippen (optaget med et atomarkraft-mikroskop), som består af to mikroporer, hvori der befinder sig et monolag af organiske molekyler. De organiske molekyler i de to mikroporer er i elektrisk kontakt med hinanden via det ultratynde lag af graphen, der ligger ovenpå som en dug (man ser tydeligt folder i "dugen").



Materialet graphen er opbygget udelukkende af kulstofatomer, der er organiseret i en hexagonal netværksstruktur. Graphen har mange bemærkelsesværdige egenskaber – for eksempel er det cirka 200 gange stærkere end stål, det leder både varme og strøm meget effektivt og er næsten gennemsigtigt.

organiske molekyler så meget, at det ødelægger deres funktionelle egenskaber. Derfor har man måtte opgive denne strategi.

I stedet har Kasper Nørgaard med sine kolleger for nylig anvist en ny vej ved at erstatte guld med graphen som topelektrode. Graphen består udelukkende af kulstofatomer organiseret i en hønsenet-lignende struktur, der kun er et enkelt atomlag tykt. Det smarte ved at bruge graphen er, at det både er elektrisk ledende og giver et "blødt" kontaktpunkt til molekylerne nedenunder, så de bevarer deres integritet. Og

så er det gennemsigtigt, hvilket giver mulighed for at lyse igennem det og på den måde have en ekstra måde at påvirke molekylerne i chippen på i stedet for udelukkende med elektrisk strøm.

### På nyt land

Man skulle måske ikke tro, at det betyder det helt store, om man udskifter det ene elektrisk ledende materiale med et andet i den ene elektrode i en "molekylær chip", men i praksis er det en helt anden kemi, der nu er på spil. Så derfor bevæger Kasper og hans kolleger sig i høj grad på nyt land i forhold til at

forstå og beskrive detaljerne i, hvad der foregår i deres molekylære chip.

»Vi forsøger nu at undersøge, hvor langt vi kan skubbe vores chip – og hvad den egentlig kan præstere,« siger Kasper. Til det formål har han for nylig sammen med sine kolleger modtaget en bevilling fra Danmarks Frie Forskningsfond | Natur og Univers.

»I dette projekt vil vi specielt fokusere på at forstå kontaktpunktet mellem vores graphen-elektroder og de enkelte lag af molekyler, vi forbinder dem til,« fortæller Kasper. »Graphen



## Om forskeren

Kasper Nørgaard er lektor ved Kemisk Institut og Nano-Science Center på Københavns Universitet, hvorfra han også modtog sin ph.d.-grad i materialekemi i 2005. Kasper forsker i grundvidenskabelige spørgsmål omkring brugen af organiske molekyler som aktive komponenter i elektriske kredsløb, og han leder et team af forskere, der med en bevilling fra Danmarks Frie Forskningsfond | Natur og Univers undersøger en ny type molekylær chip som beskrevet i artiklen. Kaspers forskningsgruppe arbejder desuden med at udvikle og fremstille graphen-materialer i stor skala til anvendelse i blandt andet industrielle coatings og printbar elektronik.



Foto: Jes Andersen

### Videre læsning

Kasper Nørgaards projekt *Getting in contact with molecules* er finansieret af Danmarks Frie Forskningsfond | Natur og Univers som et såkaldt DFF-Forskningsprojekt 2. Se DFF's bevillingsliste på [ufm.dk/forskning-og-innovation](http://ufm.dk/forskning-og-innovation)

Tao Li et al. (2013): Ultrathin reduced graphene oxide films as transparent top-contacts for light switchable solid-state molecular junctions, *Advanced Materials*, 25, 4164-4170

Kasper Nørgaard og Thomas Bjørnholm: Elektronik på molekylærskala. *Aktuel Naturvidenskab* nr. 3/2010.

er et relativt nyt materiale, og vi ved meget lidt om dets egenskaber som elektrode i elektriske kredsløb. Projektet sigter mod at forstå og udvikle molekylære designs, der sikrer den bedst mulige kontakt mellem graphen-elektroder og molekylære komponenter.»

### Forankringens kunst

I lighed med tidligere designs består bundelektroden i Kasper og kollegers chip af guld, hvorpå man forankrer de molekyler, der kommer til at virke som elektroniske komponenter mellem de to elektroder. I denne chip – samt i langt de fleste andre molekylærelektroniske anordninger eller testsystemer bruger man en såkaldt thiol-gruppe (en organisk forbindelse, der indeholder en funktionel gruppe bestående af svovl og hydrogen) til at forankre enkelte molekyler eller monolag af molekyler til guldelektroden. Thiol-grupper har dog en række begrænsninger, som gør, at forskerne som en del af projektet vil udvikle nye typer af forankringsgrupper til guldelektroder.

»De nye forankringsgrupper skal gøre det muligt både at kontrollere tætheden og orienteringen af de molekylære komponenter, der kobles til disse forankringsgrupper

og derefter forbindes til graphen-topelektroden,« siger Kasper. Han fortæller, at de her vil bruge en lovende tilgang, hvor de forbinder den molekylære komponent vinkelret til et molekyle, der har en struktur som et let kurvet ringsystem (en såkaldt TATA-plattform, hvor TATA står for triazatriangulen).

»Ved at styre tætheden af de molekylære komponenter kan vi blandt andet undersøge, om de enkelte molekyler på chippen populært sagt "snakker med" hinanden eller om de fungerer som isolerede molekylære komponenter, der er orienteret parallelt med hinanden,« siger han. Det er et led i at afklare, hvor tæt molekylerne i de selvsamlende monolag af molekyler kan ligge på hinanden, uden at de gensidigt påvirker hinanden, så der opstår nye energitilstande, man ikke er interesseret i. På fagsproget kaldes sådanne vekselvirkninger mellem molekyler for cross-talk, og det er en effekt, man gerne vil undgå i designs, hvor funktionen gerne skal være koblet snævert til funktionen af det specifikke molekyle.

### Grønne chips

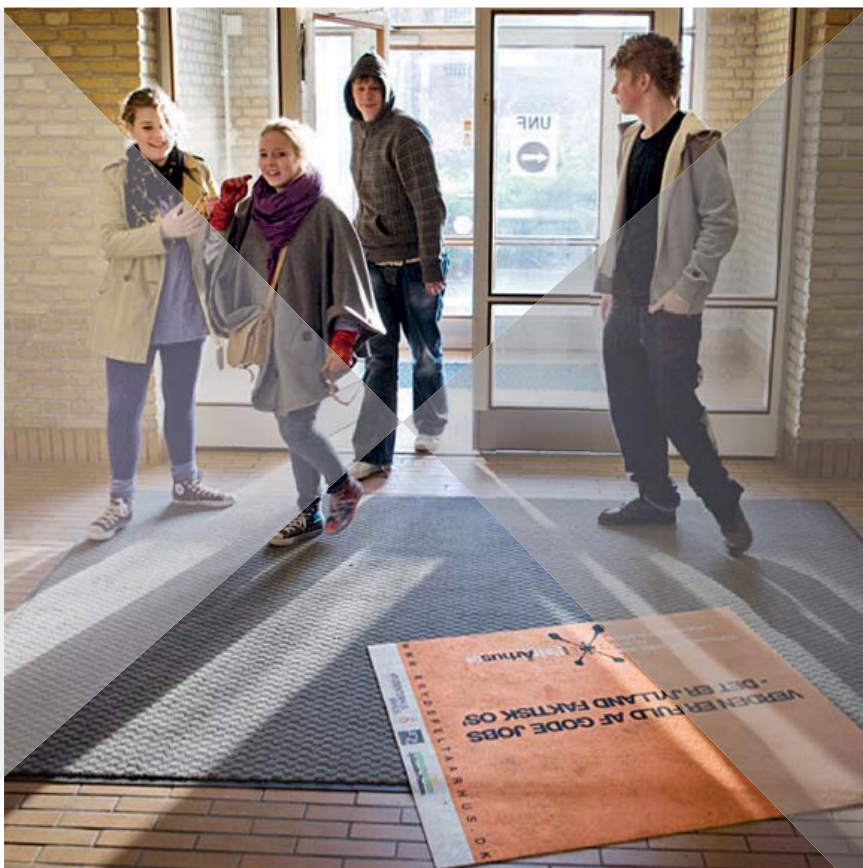
Perspektivet i at forske i molekylær elektronik som mulig erstatning for silicium-baserede computerchips

handler ikke kun om, hvor små man kan gøre sådan chips, hvordan de fungerer, og hvad de i sidste ende kan bruges til. Der kan således også være betydelige miljømæssige fordele ved i fremtiden at erstatte silicium med organiske molekyler.

»Et stort problem ved siliciumteknologi er energiforbruget – både i produktion og i drift. De fleste af os kender formentlig problemet med, at computerens processorer bliver meget varme, så der skal indbygges indtil flere kølere i en pc. Molekylær elektronik er derimod som oftest baseret på selv-samlende systemer, og derfor er fremstillingen meget mindre energikrævende. Samtidig fungerer molekylære devices ved elektron-tunnelering, som er et kvantemekanisk fænomen, hvor elektroner kan springe over eller igennem barrierer uden at bruge energi. Det betyder, at varmeafledning og såkaldt lækstrøm – uønsket strøm, der løber igennem eller på overfladen af et isolerende materiale – ikke spiller nogen nævneværdig rolle. Molekylær-elektroniske processorer vil med andre ord slet ikke blive varme på samme måde, som vi kender det i dag. Derfor kan molekylær elektronik være med til at give computeren en mere grøn fremtid,« slutter Kasper. ■

# TILBUD

TIL DIG OG DINE ELEVER FRA  
AARHUS UNIVERSITET



## DET RULLENDE UNIVERSITET

Ønsker du  
at få studerende fra  
Aarhus Universitet  
til at undervise  
dine elever  
i en hel dag?

Det rullende Universitet  
har stadig plads  
til at undervise flere  
gymnasier i dette skoleår.

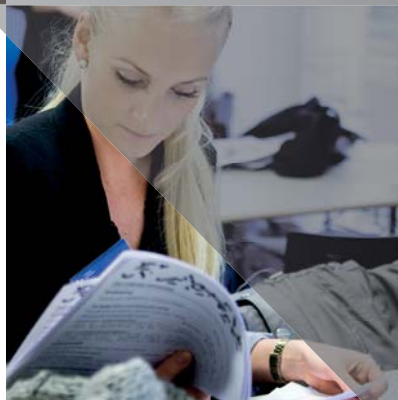
Læs mere og ansøg på:  
[au.dk/detrullendeuniversitet](http://au.dk/detrullendeuniversitet)

## MENTORPROJEKTET **SUBUNIVERSITY**

Projektet er målrettet elever  
fra ikke-akademiske hjem, som har  
evnerne til at gennemføre en  
universitetsuddannelse.

Eleverne får tilknyttet  
universitetsstuderende som  
mentorer og deltager i  
særlige arrangementer på  
Aarhus Universitet.

Læs mere på [au.dk/subuniversity](http://au.dk/subuniversity)



AARHUS  
UNIVERSITET