



(19)
Bundesrepublik Deutschland
Deutsches Patent- und Markenamt

(10) **DE 602 17 849 T2** 2007.07.12

(12) **Übersetzung der europäischen Patentschrift**

(97) **EP 1 386 362 B1**

(21) Deutsches Aktenzeichen: **602 17 849.5**

(86) PCT-Aktenzeichen: **PCT/US02/13476**

(96) Europäisches Aktenzeichen: **02 766 859.9**

(87) PCT-Veröffentlichungs-Nr.: **WO 2002/089229**

(86) PCT-Anmeldetag: **30.04.2002**

(87) Veröffentlichungstag
der PCT-Anmeldung: **07.11.2002**

(97) Erstveröffentlichung durch das EPA: **04.02.2004**

(97) Veröffentlichungstag
der Patenterteilung beim EPA: **24.01.2007**

(47) Veröffentlichungstag im Patentblatt: **12.07.2007**

(51) Int Cl.⁸: **H01L 51/00** (2006.01)
B82B 1/00 (2006.01)

(30) Unionspriorität:

846135 30.04.2001 US

(73) Patentinhaber:

**Hewlett-Packard Co. (n.d.Ges.d.Staates
Delaware), Palo Alto, Calif., US**

(74) Vertreter:

**Schoppe, Zimmermann, Stöckeler & Zinkler, 82049
Pullach**

(84) Benannte Vertragsstaaten:

DE, FR, GB

(72) Erfinder:

**ZHANG, Xiao-An, Sunnyvale, CA 94086, US;
WILLIAMS, R.Stanley, Mountain View, CA 94040,
US; WALMSLEY, Robert G., Palo Alto, CA 94306,
US; VINCENT, Kent D, Cupertino, CA 95014, US**

(54) Bezeichnung: **BISTABILE MOLEKULARE MECHANISCHE BAUELEMENTE MIT EINEM MITTELDREHSEGMENT,
DAS DURCH EIN ELEKTRISCHES FELD AKTIVIERT WIRD, FÜR ELEKTRONISCHE SCHALT-, GATING- UND
SPEICHERANWENDUNGEN**

Anmerkung: Innerhalb von neun Monaten nach der Bekanntmachung des Hinweises auf die Erteilung des europäischen Patents kann jedermann beim Europäischen Patentamt gegen das erteilte europäische Patent Einspruch einlegen. Der Einspruch ist schriftlich einzureichen und zu begründen. Er gilt erst als eingelegt, wenn die Einspruchsgebühr entrichtet worden ist (Art. 99 (1) Europäisches Patentübereinkommen).

Die Übersetzung ist gemäß Artikel II § 3 Abs. 1 IntPatÜG 1991 vom Patentinhaber eingereicht worden. Sie wurde vom Deutschen Patent- und Markenamt inhaltlich nicht geprüft.

Beschreibung

TECHNISCHES GEBIET

[0001] Die vorliegende Erfindung bezieht sich allgemein auf elektronische Vorrichtungen, deren Funktionslängenskalen in Nanometern gemessen werden, und insbesondere auf Molekülklassen, die ein elektronisches Schalten liefern. Elektronische Vorrichtungen bzw. Bauelemente sowohl eines Mikrometer- als auch einer Nanometer-Maßstabs können gemäß den Lehren des vorliegenden Dokuments aufgebaut werden.

STAND DER TECHNIK

[0002] Das Gebiet der molekularen Elektronik steckt noch in den Kinderschuhen. Bis dato gibt es zwei in der technischen Literatur veröffentlichte überzeugende Darstellungen von Molekülen als elektronische Schalter; siehe C.P. Collier et al., Science, Bd. 285, S. 391-394 (16. Juli 1999) und C.P. Collier et al., Science, Bd. 289, S. 1172-1175 (18. August 2000), bezüglich dieses Themas herrscht unter Wissenschaftlern jedoch auch viel Spekulation und Interesse. In der veröffentlichten Arbeit wurde ein als Rotaxan oder als Catenan bezeichnetes Molekül zwischen zwei Metallelektroden festgehalten und durch Anlegen einer positiven Vorspannung über das ganze Molekül hinweg veranlasst, von einem EIN-Zustand zu einem AUS-Zustand zu schalten. Der EIN- und der AUS-Zustand unterschieden sich bezüglich des spezifischen Widerstands ungefähr um einen Faktor von 100 bzw. 5 bei dem Rotaxan bzw. dem Catenan.

[0003] Das Hauptproblem bei dem Rotaxan bestand darin, dass es ein irreversibler Schalter ist. Es kann nur einmal umgelegt werden. Somit kann es bei einem programmierbaren Nur-Lese-Speicher (PROM – programmable read-only memory) verwendet werden, jedoch nicht in einer ROM-ähnlichen Vorrichtung oder in einem rekonfigurierbaren System, z.B. einem fehlertoleranten Kommunikations- und Logiknetzwerk. Außerdem erfordert das Rotaxan, dass eine Oxidations- und/oder Reduktionsreaktion erfolgt, bevor der Schalter umgelegt werden kann. Dies erfordert den Aufwand einer beträchtlichen Energiemenge, um den Schalter umzulegen. Außerdem bewirkt die Größe und Komplexität von Rotaxanen und damit verwandten Verbindungen potentiell eine Verlangsamung der Schaltzeiten der Moleküle. Die Hauptprobleme bei den Catenanen sind ein geringes EIN-Zu-AUS-Verhältnis und eine langsame Schaltzeit.

[0004] Die US 6128214 offenbart ein Molekulardraht-Kreuzschienenspeicher-System (MWCM-System; MWCM = molecular wire crossbar memory). Das MWCM umfasst ein zweidimensionales Array einer Mehrzahl von Vorrichtungen im Nanometerbereich, wobei jede Vorrichtung einen Verbindungspunkt bzw. Übergang aufweist, der durch ein Paar von überkreuzten Drähten, wobei ein Draht einen anderen kreuzt, und zumindest eine Verbinderart, die das Paar von gekreuzten Drähten in dem Verbindungspunkt verbindet, gebildet ist. Die Verbinderart umfasst einen bistabilen molekularen Schalter. Der Verbindungspunkt bildet entweder einen Widerstand oder eine Diode oder einen asymmetrischen nicht-linearen Widerstand. Der Verbindungspunkt weist einen Zustand auf, der in der Lage ist, durch Anlegen einer ersten Spannung verändert und durch Anlegen einer zweiten, zerstörungsfreien Spannung erfasst zu werden.

[0005] Die WO 9835271 bezieht sich auf Moleküle, die an ein Substrat (4) angelagert werden und zwischen unterschiedlichen stabilen oder metastabilen Konformationen (18, 19) geschaltet werden können. Zumindest eine dieser Konformationen (19) wird durch die Nähe des Substrats (4) erzeugt und/oder stabilisiert. Die Erfindung bezieht sich ferner auf ein aus Schichten bestehendes Medium, das derartige Moleküle umfasst, und auf ein Verfahren zum gesteuerten Schalten derartiger Moleküle. Das aus Schichten bestehende Medium ist als Resists bzw. Lacke für lithographische Anwendungen, Datenspeichermedien und Promotor eines Elektronenübergangs zwischen zwei Medien verwendbar. Das Verfahren ist dahin gehend nützlich, Strukturen in dem aus Schichten bestehenden Medium zu erzeugen und abzufragen.

OFFENBARUNG DER ERFINDUNG

[0006] Gemäß der vorliegenden Erfindung ist ein Molekularsystem für reversible elektronische Schalter im Nanometerbereich, im Einzelnen für durch ein elektrisches Feld aktivierte Molekularschalter vorgesehen, die eine durch ein elektrisches Feld bewirkte Veränderung des Bandabstands aufweisen, die über eine Veränderung der molekularen Konformation oder eine Isomerisation erfolgt. Ein Verändern einer erweiterten Konjugation mittels einer Veränderung der chemischen Bindung, um den Bandabstand zu verändern, wird bewerkstelligt, indem das Molekularsystem mit einem Drehabschnitt (Rotor) und zwei stationären Abschnitten (Statoren), zwischen denen der Rotor angelagert ist, versehen wird.

[0007] Die vorliegende Erfindung liefert reversible elektronische Schalter im Nanometerbereich, die ohne weiteres zusammengefügt werden können, um Kreuzschienen- und andere Schaltungen herzustellen. Die Kreuzschienenschaltungen wurden in der oben aufgeführten Serie von Patentanmeldungen und der erteilten Patentschrift beschrieben. Die Schaltungen liefern Speicher-, Logik- und Kommunikationsfunktionen. Ein Beispiel der elektronischen Schalter ist die so genannte über Kreuz verdrahtete Vorrichtung, die ein Paar von überkreuzten Drähten umfasst, die einen Verbindungspunkt bilden, wo ein Draht einen anderen in einem Winkel, der nicht null Grad beträgt, kreuzt, und zumindest eine Verbindungsart umfasst, die das Paar von gekreuzten Drähten in dem Verbindungspunkt verbindet. Der Verbindungspunkt weist eine Funktionsabmessung in Nanometern oder, für Mehrschichten, größer auf. Die Verbindungsart umfasst das hierin offenbarte und beanspruchte Molekularsystem.

[0008] Die vorliegende Erfindung stellt eine neue Art eines Schaltmechanismus vor, nämlich eine durch ein elektrisches Feld erzeugte Drehung eines drehbaren Mittelabschnitts (Rotor) eines Moleküls. Somit wird das Molekül beim Kippen des Schalters weder oxidiert noch reduziert, wodurch die Notwendigkeit, chemische Bindungen zu zerstören und potentiell eine nicht-reversible Reaktion einzuleiten, vermieden wird. Ferner ist der sich bewegende Teil des Moleküls ziemlich klein, so dass die Schaltzeit sehr schnell sein sollte. Ferner sind die Moleküle viel einfacher und somit leichter und kostengünstiger herzustellen als die Rotaxane und damit verwandte Verbindungen.

[0009] Die Vorrichtungen der vorliegenden Erfindung werden generisch als Elektrisches-Feld-Vorrichtungen angesehen und sind von früheren Ausführungsbeispielen (die bei den oben erwähnten verwandten Patentanmeldungen und der oben erwähnten verwandten Patentschrift beschrieben sind), die auf elektrochemische Vorrichtungen bzw. Bauelemente ausgerichtet sind, generisch zu unterscheiden.

[0010] Man erwartet, dass das Molekularsystem der vorliegenden Erfindung in einer Vielzahl von Anwendungen eingesetzt wird, einschließlich, aber nicht ausschließlich, Speichern, Logikvorrichtungen, Multiplexern, Demultiplexern, konfigurierbarer Verbindungen für integrierte Schaltungen, feldprogrammierbarer Gatterarrays (FGPAs), Kreuzschienenschaltern und Kommunikationsvorrichtungen wie z.B. Mobiltelefone, mobiler Geräte und PDAs.

KURZE BESCHREIBUNG DER ZEICHNUNGEN

[0011] [Fig. 1a](#) ist eine schematische Darstellung zweier überkreuzter Drähte, wobei sich an dem Schnittpunkt der zwei Drähte zumindest ein Molekül befindet;

[0012] [Fig. 1b](#) ist ein perspektivischer Aufriss, der die in [Fig. 1a](#) gezeigte Vorrichtung zeigt;

[0013] [Fig. 2](#) ist ein schematisches Modell, das eine durch ein elektrisches Feld erzeugte Bandabstandsveränderung mittels einer Veränderung der Molekularkonformation (Modell vom Rotor/Stator-Typ) zeigt; und

[0014] [Fig. 3](#) ist eine schematische Darstellung eines zweidimensionalen Arrays von Schaltern der vorliegenden Erfindung, die einen 6x6-Kreuzschienenschalter zeigt.

BESTE MODI ZUM DURCHFÜHREN DER ERFINDUNG

Definitionen

[0015] Gemäß der Verwendung in dem vorliegenden Dokument bedeutet der Begriff „selbstjustiert“, wenn er auf „Verbindungspunkt“ angewendet wird, dass der Verbindungspunkt, der die Schalt- und/oder sonstige elektrische Verbindung zwischen zwei Drähten bildet, überall dort erzeugt wird, wo zwei Drähte, von denen einer beschichtet oder funktionalisiert sein kann, einander kreuzen, da der Vorgang des Kreuzens den Verbindungspunkt erzeugt.

[0016] Der Begriff „sich selbst organisierend“ bezieht sich gemäß der Verwendung in dem vorliegenden Dokument auf ein System, das auf Grund der Identität der Komponenten des Systems auf natürliche Weise ein bestimmtes geometrisches Muster annimmt; das System erzielt durch Annehmen dieser Konfiguration zumindest ein lokales Minimum bezüglich seiner Energie.

[0017] Der Begriff „einmalig konfigurierbar“ bedeutet, dass ein Schalter seinen Zustand nur einmal mittels eines irreversiblen Vorgangs wie z.B. einer Oxidations- oder Reduktionsreaktion verändern kann; ein derartiger

Schalter kann beispielsweise die Basis eines programmierbaren Nur-Lese-Speichers (PROM) sein.

[0018] Der Begriff „rekonfigurierbar“ bedeutet, dass ein Schalter seinen Zustand mittels eines reversiblen Vorgangs wie z.B. einer Oxidation oder Reduktion viele Male verändern kann; mit anderen Worten kann der Schalter viele Male geöffnet und geschlossen werden, z.B. die Speicherbits in einem Direktzugriffsspeicher (RAM).

[0019] Der Begriff „bistabil“ bedeutet, wenn er auf ein Molekül angewendet wird, ein Molekül, das zwei Zustände einer relativ geringen Energie aufweist, die durch eine Energie- (oder Aktivierungs-)Barriere getrennt sind. Das Molekül kann entweder auf irreversible Weise von einem Zustand zum anderen geschaltet werden (einmalig konfigurierbar) oder auf reversible Weise von einem Zustand zum anderen geschaltet werden (rekonfigurierbar).

[0020] Abmessungen im Mikrometerbereich bezieht sich auf Abmessungen, die eine Größe zwischen 1 Mikrometer und einigen wenigen Mikrometern umfassen.

[0021] Abmessungen im Submikrometerbereich bezieht sich auf Abmessungen, die von 1 Mikrometer bis hinunter zu 0,05 Mikrometern betragen.

[0022] Abmessungen im Nanometerbereich bezieht sich auf Abmessungen, die von 0,1 Nanometer bis 50 Nanometer (0,05 Mikrometer) betragen.

[0023] Drähte im Mikrometerbereich und im Submikrometerbereich bezieht sich auf stab- oder bandförmige Leiter oder Halbleiter mit Breiten oder Durchmessern, die die Abmessungen von 0,05 bis 10 Mikrometer, Höhen, die zwischen wenigen zehn Nanometern bis zu einem Mikrometer betragen können, und Längen von mehreren Mikrometern oder mehr, aufweisen.

Grundlegende Informationen über Schalter mit überkreuzten Drähten des Standes der Technik

[0024] Die wesentlichen Vorrichtungsmerkmale sind in [Fig. 1a-Fig. 1b](#) gezeigt und sind in den oben angeführten Patentanmeldungen und der oben angeführten Patentschrift ausführlich erörtert. Ein Schalter **10** mit überkreuzten Drähten umfasst zwei Drähte **12**, **14**, von denen jeder ein Metall- oder Halbleiterdraht ist, und die in einem nicht null betragenden Winkel überkreuzt sind. Zwischen diesen Drähten befindet sich eine Schicht von Molekülen oder Molekularverbindungen **16**, die in [Fig. 1a](#) und [Fig. 1b](#) mit R bezeichnet ist. Die jeweiligen Moleküle **18** (mit R_S bezeichnet), die an dem Schnittpunkt der beiden Drähte **12**, **14** eingeschlossen sind, sind als Schaltermoleküle identifiziert, hierin auch austauschbar als Verbindungspunkt bzw. Übergang bezeichnet. Wenn über die Drähte eine entsprechende Spannung angelegt wird, werden die Schaltermoleküle entweder oxidiert oder reduziert. Wenn ein Molekül oxidiert (reduziert) wird, dann wird eine zweite Spezies reduziert (oxidiert), so dass die Ladung ausgeglichen wird. Diese beiden Spezies werden anschließend als Redox-Paar bezeichnet. Ein Beispiel dieser Vorrichtung bestünde darin, dass ein Molekül reduziert werden soll und dann ein zweites Molekül (die andere Hälfte des Redox-Paares) oxidiert wird. Bei einem anderen Beispiel wird ein Molekül reduziert, und einer der Drähte wird oxidiert. Bei einem dritten Beispiel wird ein Molekül oxidiert, und einer der Drähte wird reduziert. Bei einem vierten Beispiel wird ein Draht oxidiert, und ein dem anderen Draht zugeordnetes Oxid wird reduziert. In allen Fällen beeinflusst die Oxidation oder Reduktion den Tunnelungsabstand oder die Tunnelungsbarrierehöhe zwischen den zwei Drähten, wodurch sie die Rate des Ladungstransports über den Drahtverbindungspunkt hinweg exponentiell verändert und als Basis für einen Schalter dient.

[0025] Die durch diese Vorrichtungen durchgeführten elektrischen Aufgaben werden zum großen Teil durch die Arten von Drähten (Elektroden) und der zwischen den Drähten befindlichen Materialien, die verwendet werden, bestimmt. Tabelle I stellt die verschiedenen Arten von Vorrichtungen vor, die aus diversen Kombinationen der Drähte **12**, **14** in den [Fig. 1a-Fig. 1b](#) hergestellt werden könnten.

Tabelle I. Draht-(Elektroden-)Materialien

Vorrichtungs- typ	Metall- Metall (iden- tisch)	Metall- Metall (unter- schied- lich)	Metall- Halbleiter	Halbleiter- Halbleiter (p-n- Übergang)	Halbleiter- Halbleiter (Heteroüber- gang)
Widerstand	X	X	X		
Tunnelungs- widerstand	X	X	X		
Resonanz- tunnelungs- widerstand	X	X	X		
Diode		X	X	X	X
Tunnelungs- diode		X	X	X	X
Resonanztun- nelungsdiode		X	X	X	X
Batterie		X	X		X

[0026] Je nach den Molekülen oder Materialien, die zwischen den Drähten (den Elektroden) verwendet werden, kann jeder Verbindungspunkt bzw. Übergang entweder die nachstehend beschriebenen Arten einer elektrischen Funktion unmittelbar auf einen Kontakt der Drähte hin anzeigen, oder der Verbindungspunkt kann eine Schaltfunktion aufweisen, die dahin gehend agiert, die zwei Drähte elektrisch miteinander zu verbinden oder voneinander zu trennen. Dieser Schalter kann entweder einmalig konfigurierbar oder rekonfigurierbar sein. Im ersten Fall ist der Anfangszustand des Schalters offen oder geschlossen. Im zweiten Fall ist es dadurch, dass die Polarität und der Betrag der Spannung an dem Schalter über die entsprechenden Schwellwerte hinaus einem Zyklus unterzogen werden, möglich, die ordnungsgemäß ausgewählten Materialien oder Moleküle auf reversible Weise zu oxidieren oder zu reduzieren, um den Schalter viele Male zu schließen oder zu öffnen. In beiden Fällen hängt die Art der elektrischen Verbindung, die zwischen den Drähten hergestellt wird, im geschlossenen Zustand von den Materialien, aus denen die Drähte (oder Elektroden) hergestellt sind, sowie von der Identität der Moleküle oder Materialien zwischen den Drähten ab.

[0027] Die obige Tabelle I zeigt eine Matrix der verschiedenen Arten von Funktionen, die aus diversen Kombinationen von Elektrodenmaterialien und Materialien oder Molekülen, die bei dem Übergang verwendet werden, erhalten werden können. Ein Widerstand weist eine lineare Strom/Spannung-Charakteristik auf und wird hergestellt, indem der Übergang zwischen verschiedenen Arten von Drähten absichtlich überreduziert wird, um im Wesentlichen einen Kurzschluss zwischen den Drähten zu bilden. Das Gegenteil dieses Prozesses besteht darin, einen Übergang zu überoxidieren, wodurch der Draht in einer örtlich begrenzten Region verbraucht und der Draht in diesem Draht an der Position des Übergangs effektiv gebrochen wird (ein offener Stromkreis erzeugt wird). Ein Tunnelungswiderstand erhält eine dünne, etwa 2 Nanometer dicke isolierende Barriere zwischen Drähten aufrecht und weist eine exponentielle Strom/Spannung-Charakteristik auf. In dem Fall, dass Übergangsmoleküle und -materialien einen scharf definierten Energiezustand in dem Bandabstand einer elektrisch isolierenden Barriere aufweisen, worauf durch ein elektrisches Vorspannen des Übergangs zugegriffen werden kann, kann die Verbindung zwischen den Drähten einen Fluss eines elektrischen Stroms aufweisen, der durch den Prozess des Resonanztunnels dominiert wird. Das Resonanztunneln kann einen oder mehrere Wendepunkte der andernfalls exponentiellen Strom/Spannung-Charakteristik eines Tunnelungswiderstands erzeugen. Eine Diode ist ein Übergang, der Strom leichter in eine Richtung leitet als in die andere und somit bezüglich der Strom/Spannung-Charakteristik für positive und negative Spannungen eine Asymmetrie aufweist. Eine Tunnelungsdiode weist sowohl die Positive-/Negative-Spannung-Asymmetrie der Diode als auch die exponentielle Strom/Spannung-Charakteristik des Tunnelungswiderstands auf. Eine Resonanztunnelungs-

diode weist eine Positive/Negative-Spannung-Asymmetrie auf, plus sie weist eine Spitze bezüglich ihrer Strom/Spannung-Charakteristik auf, so dass der Betrag des Stroms über einen begrenzten Bereich eines zunehmenden Betrags der Spannung in der Tat abnimmt, was ein Phänomen ist, das als spezifischer negativer Differentialwiderstand bekannt ist. Im Allgemeinen weist jeglicher echte Übergang zwischen Drähten, der anhand der oben beschriebenen Prozesse gebildet ist, in der Tat zwei oder mehr der beschriebenen elektrischen Funktionen auf, wobei die effektiven Schaltungselemente in Reihe geschaltet sind.

[0028] Somit kann die vorliegende Erfindung mit einer beliebigen Anzahl von metallischen oder halbleitenden Draht/Molekül-Kombinationen ausgeführt werden, je nach den Vorrichtungseigenschaften, die man sich von der zusammengebauten Schaltung wünscht.

Grundlegende Informationen über die Herstellung von Drahtelektroden gemäß dem Stand der Technik

[0029] Prozessdefinierte Drähte (als Drähte definiert, die anhand herkömmlicher Elektronische-Schaltung-Verarbeitungstechniken hergestellt; Drähte werden üblicherweise als Teil einer Schaltung auf einem Substrat hergestellt):

Metallische und Halbleiterdrähte mit Durchmessern, die von mehreren Mikrometern bis zu einem einzigen Mikrometer reichen (als im Mikrometerbereich liegend definiert) oder mit Durchmessern, die von einem einzigen Mikrometer bis hinunter zu 40 Nanometern (als im Submikrometerbereich liegend definiert) bezüglich des Durchmessers reichen, können unter Verwendung einer hinreichend etablierten Technik, einschließlich lithographischer (optischer, Ultraviolett- oder Elektronenstrahl-)Technologien hergestellt werden. Diese Drähte weisen normalerweise eine Bandform oder einen rechteckigen Querschnitt auf, obwohl kreisförmige Querschnitte nicht ausgeschlossen sind, wobei die Breite des Drahtes durch den lithographischen Prozess bestimmt wird, der dazu verwendet wird, den Draht zu definieren, und wobei seine Höhe durch die Menge an Material definiert wird, die mittels Lithographie in der Region aufgebracht wird.

[0030] Chemisch hergestellte Drähte (diese Drähte werden anhand von Techniken hergestellt, die sich von herkömmlicher Elektronische-Verarbeitung-Technologie unterscheiden; Drähte werden üblicherweise als Volumenmaterial statt als Bestandteil einer Schaltungsplatte hergestellt):

Metallische und Halbleiter-Nanodrähte sind als Drähte mit einem Durchmesser unterhalb 50 Nanometern (üblicherweise 2 bis 20 Nanometern) und einer Länge im Bereich von 0,1 Mikrometern bis 50 Mikrometern (üblicherweise 5 bis 10 Mikrometern) definiert. Diese können unter Verwendung einer beliebigen einer Anzahl von Techniken, die in den nachstehend aufgeführten Referenzdokumenten beschrieben sind, chemisch hergestellt werden.

[0031] Ein Beispiel einer Technik zur Herstellung von Halbleiter-Nanodrähten aus dem halbleitenden Element Germanium, über die berichtet wird, besteht darin, Germaniumtetrachlorid und Phenyltrichlorgermanium mit einer Dispersion aus Natriummetall in dem Lösungsmittel Toluol und bei einer Temperatur in der Nähe von 300°C in einem geschlossenen Gefäß in einer inerten Umgebung über einen Zeitraum von mehreren Tagen miteinander reagieren zu lassen. Diese Herstellung erzeugt Einkristall-Germanium-Nanodrähte mit Durchmessern von 3 bis 30 Nanometern und mit Längen von 0,5 bis 10 Mikrometern.

[0032] Ein zweites Beispiel einer Technik, über die berichtet wird, zur Herstellung von Halbleiter-Nanodrähten aus dem halbleitenden Element Silizium besteht darin, ein Zielobjekt, das elementares Silizium und Eisen enthält, einer Laserbedampfung zu unterziehen. Das Zielobjekt wird in einen Vakuumofen bei 1.300°C platziert, und während des Bedampfungsprozesses lässt man ein Inertgas durch den Ofen strömen. Diese Technik erzeugt Siliziumdrähte, die Durchmesser im Bereich von 20 bis 30 Nanometern und Längen von 1 bis 20 Mikrometern aufweisen.

[0033] Ein Beispiel einer Technik, über die berichtet wird, zur Herstellung von metallischen Nanodrähten des metallischen Elements Gold besteht darin, Golddrähte in den Poren eines anodisch geätzten Aluminiumoxid-Dünnschicht auf elektrochemische Weise wachsen zu lassen. Das Aluminiumoxid wird in einer Säurelösung aufgelöst, wodurch die Gold-Nanodrähte freigegeben werden, die anschließend gesammelt werden. Auf diese Weise gewachsene Gold-Nanodrähte sind durch Durchmesser im Bereich zwischen 20 und 30 Nanometern und Längen im Bereich von 0,5 bis 5 Mikrometern charakterisiert.

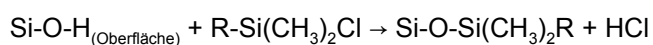
[0034] Nanodrähte aus verschiedenen metallischen und halbleitenden Materialien können auf vielerlei Weise hergestellt werden. Manche dieser Vorrichtungen erfordern dotierte Halbleiterdrähte, z.B. dotiertes Si.

[0035] Für den Fall von Si-Drähten können die Drähte dotiert werden, wenn die Drähte physisch hergestellt

werden. In diesem Fall ist es notwendig, das Dotierungsmittel in das Reaktionsgefäß zuzugeben, wenn die Drähte gebildet werden. Beispielsweise wird bei der oben beschriebenen Laserablations-/Vakuufofen-Herstellungstechnik eine geringe Menge eines Dotierungsgases wie z.B. Phosphortrihydrid (PH_3) oder Arsenetrihydrid (AsH_3) zu dem Inertgas (z.B. Argon), das während des Laserablations-/Drahtbildungsprozesses durch den Vakuufofen strömt, hinzugegeben.

[0036] Umgekehrt können diese Drähte modulationsdotiert werden, indem ihre Oberflächen mit entsprechenden Molekülen beschichtet werden – entweder elektronenziehenden Gruppen (Lewis-Säuren, z.B. Bortrifluorid (BF_3)) oder elektronenspendenden Gruppen (Lewis-Basen, z.B. Alkylaminen), um sie zu Leitern vom p-Typ bzw. vom n-Typ zu machen. Siehe nach folgend aufgelistete Drahtherstellungswege. [Fig. 1b](#) zeigt eine Beschichtung **20** auf einem Draht **12** und eine Beschichtung **22** auf einem Draht **14**. Die Beschichtungen **20**, **22** können Modulationsdotierungsbeschichtungen, Tunnelungsbarrieren (z.B. Oxide) oder andere im Nanobereich liegende, funktionell geeignete Materialien sein. Alternativ dazu können die Drähte **12**, **14** selbst mit einer oder mehreren R-Spezies **16** beschichtet sein, und dort, wo sich die Drähte überkreuzen, entsteht R_s **18**. Oder als weitere Alternative können die Drähte **12**, **14** beispielsweise mit molekularen Spezies **20** bzw. **22** beschichtet sein, die ermöglichen, dass einer oder beide Drähte suspendiert werden, um kolloidale Suspensionen zu bilden, wie nachstehend erörtert wird.

[0037] Um die Drähte anhand einer Modulationsdotierung zu dotieren, ist es notwendig, die Oberfläche der Drähte unter Verwendung von organischen oder anorganischen Molekülen, die sich auf kovalente Weise an die Si-O-H-Gruppen an der Oberfläche der Drähte binden, chemisch zu funktionalisieren. Wenn Silizium-Nanodrähte der Luft ausgesetzt werden, entsteht auf natürliche Weise eine dünne Oberflächenschicht (1 nm) aus SiO_2 , und an der Grenzfläche zwischen SiO_2 und Luft wird die SiO_2 -Oberfläche durch Si-O-H-Bindungen abgeschlossen. Gruppen, die sich an Si-O-H-Gruppen binden oder solche ersetzen, umfassen, sind jedoch nicht beschränkt auf, $\text{R-Si}(\text{CH}_3)_x(\text{OCH}_{3-x})$, $\text{R-Si}(\text{CH}_3)_x(\text{OCH}_2\text{CH}_{3-x})$, $\text{R-Si}(\text{CH}_3)_x\text{Cl}_{3-x}$ und andere. In diesem Fall stellt R einen organischen oder anorganischen Anteil dar, der elektronenziehende (eine Lewis-Säure) oder elektronenspendende Gruppen (eine Lewis-Base) enthalten kann. Diese Chemie des Bindens von Molekülen an eine SiO_2 -passivierte Siliziumoberfläche ist allgemein anerkannt. Eine veröffentlichte exemplarische Reaktion bezüglich eines Bindens von Molekülen an die Oberfläche von SiO_2 -passiviertem Silizium lautet wie folgt:



[0038] Andere Halbleiterdrähte können mit Organoaminen, Organothiolen, Organophosphaten usw. funktionalisiert werden.

[0039] Augenscheinlich ist in der technischen Literatur bisher keine Beschreibung dessen erschienen, wie chemisch synthetisierte Halbleiterdrähte modulationsdotiert werden können.

[0040] Für den Fall anderer Nanodrähte, z.B. Metall-Nanodrähte, können die Drähte mit R-SH (bei Gold- oder Silberdrähten) oder R-NH_2 (bei Platindrähten und Palladiumdrähten) oder $\text{R-CO}_2\text{H}$ (bei anderen Metallen wie z.B. Al_2O_3 -beschichteten Aluminiumdrähten oder Titandrähten) chemisch funktionalisiert werden, wobei die R-Gruppe einen organischen Anteil bezeichnet, der dem Draht gewisse chemische Eigenschaften verleiht – z.B. die Eigenschaft, die es Fachleuten ermöglicht, die Drähte als Kolloid in einem Lösungsmittel zu dispergieren. Bei einem Beispiel könnten Golddrähte mit Dodecanthiol ($\text{C}_{12}\text{H}_{25}\text{SH}$) funktionalisiert werden. Das Dodecanthiol versorgt die Drähte nicht nur mit einer dünnen Oberflächentunnelungsbarriere, sondern ermöglicht auch, dass die Drähte in einfachen organischen Lösungsmitteln wie z.B. Hexan oder Chloroform dispergiert werden können.

Grundlegende Informationen über Drahtherstellungswege des Standes der Technik

[0041] Die folgenden Materialien können gemäß den aufgelisteten Referenzdokumenten als Nanodrähte hergestellt werden.

Silizium: A.M. Morales et al., "A laser ablation method for the synthesis of crystalline semiconductor nanowires", *Science*, Bd. 279, S. 208-211 (9. Jan. 1998).

Germanium: J.R. Heath et al., "A liquid solution synthesis of single crystal germanium quantum wires", *Chemical Physics Letters*, Bd. 208, S. 263-268 (11. Juni 1993).

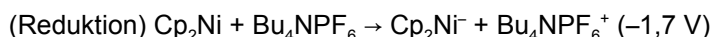
Metall-Nanodrähte: V.P. Menon et al., "Fabrication and Evaluation of Nano-electrode Ensembles", *Analytical Chemistry*, Bd. 67, S. 1920-1928 (1. Juli 1995).

Funktionalisierendes Silizium: T. Vossmeier et al., "Combinatorial approaches toward patterning nanocrystals", *Journal of Applied Physics*, Bd. 84, S. 3664-3670 (1. Okt. 1998) (eines einer Anzahl von Referenzdoku-

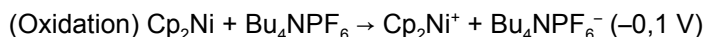
menten).

Funktionalisieren der Oberflächen von Gold-Nanostrukturen: D.V. Leff et al., „Thermodynamic Size Control of Au Nanocrystals: Experiment and Theory“, The Journal of Physical Chemistry, Bd. 99, S. 7036-7041 (4. Mai 1995).

[0042] Molekularschaltkomponenten können wiederum je nach den gewünschten Eigenschaften der Vorrichtung von einer beliebigen Anzahl unterschiedlicher Klassen von Molekülen stammen. Die Hauptanforderung an die Moleküle besteht darin, dass sie, wenn sie zwischen zwei Drähten vorliegen, durch Anlegen einer Spannung über die Drähte elektrochemisch modifiziert (d.h. oxidiert oder reduziert) werden können. Wenn die Molekularkomponenten auf diese Weise modifiziert werden, besteht der Nettoeffekt darin, dass die Tunnelungsbarriere zwischen den zwei Drähten modifiziert und die Rate des Stromflusses verändert wird. Dies bildet die Basis eines Schalters, der wiederum für Speicher, Logikoperationen und Kommunikations- und Signalaroutingnetzwerke verwendet werden kann. Molekularschalter können Redox-Paare von Molekülen umfassen, bei denen ein Anlegen einer Spannung eines der Moleküle reduziert und das andere oxidiert. Ein Beispiel eines derartigen molekularen Redox-Paares könnte Folgendes sein: Nickelocen (Di-cyclopentadienylnickel) oder Cp_2Ni , mit Tetrabutylammoniumhexafluorophosphat (Bu_4NPF_6). Die Reaktion würde dann folgendermaßen lauten:



oder



[0043] Das Nickelocen-System ist insofern von besonderem Interesse, als die Reduktion, wenn sie anhand einer zyklischen Lösungsphasen-Voltammetrie sondiert wird, stark asymmetrisch ist. Diese Asymmetrie ist analog zu Magnetisierungshysteresekurven, die die Basis für stabile und wiederbeschreibbare Magnetspeicher bilden. Jedoch ist in der Gegenwart von Sauerstoff die Reduktion von Nickelocen irreversibel, wie anhand von Lösungsphasen-Voltammetrie sondiert wird. In beiden Fällen modifiziert eine Reduktion oder Oxidation dieses Systems die Tunnelungsbarriere zwischen den zwei Drähten, zwischen denen die Moleküle vorliegen. Somit könnte dieses System entweder als rekonfigurierbarer bzw. einmalig konfigurierbarer Molekularschalter fungieren. Was Metallocen-Systeme betrifft, siehe z.B. J.D.L. Holloway et al., „Electron-transfer reactions of metallocenes: Influence of metal Oxidation state on structure and reactivity“, Journal of the American Chemical Society, Vol. 101, S. 2038-2044 (11. April 1979).

[0044] Die Verbinder-Spezies **16** umfasst ein Material, das eine bedeutende oder messbare Hysterese in seiner Strom/Spannung-Kurve aufweist, die entweder aus einer Lösungs-Elektrochemie oder aus Strom/Spannung-Charakteristika bei einem Festkörper-Übergang erhalten wird. Beispiele derartiger Spezies umfassen Metallocene, Rotaxane, Pseudo-Rotaxane und Catenane, die sich auf intramolekulare Wasserstoffbrückenbindung stützen. Obwohl derartige Moleküle für den offenbarten Zweck nützlich sind, werden jedoch einfache intramolekulare Wasserstoffbrückenbindungskräfte unter bestimmten Bedingungen relativ leicht überschritten, wie oben erörtert wurde.

Vorliegende Erfindung

[0045] Die vorliegende Erfindung wandelt Moleküle in aktive elektronische Bauelemente um, die mit einem externen elektrischen Feld geschaltet werden können. Die Grundidee besteht darin, in die Moleküle ein drehbares Mittelsegment (Rotor) hineinzuentwerfen, das ein großes Dipol-Moment (siehe Beispiele 1 und 2 unten) aufweist und das zwei andere Abschnitte des Moleküls, die immobilisiert sind (Statoren), verbindet. Unter dem Einfluss eines angelegten elektrischen Feldes versucht das Vektor-Dipol-Moment des Rotors, sich parallel zu der Richtung des externen Feldes auszurichten. Jedoch ist das Molekül derart entworfen, dass inter- und/oder intramolekulare Kräfte vorliegen, z.B. Wasserstoffbrückenbindungen oder Dipol-Dipol-Interaktionen sowie sterische Abstoßungen, die den Rotor in bestimmten Orientierungen bezüglich der Statoren stabilisieren. Somit ist ein großes Feld erforderlich, um zu bewirken, dass sich der Rotor aus seiner anfänglichen Orientierung löst und sich bezüglich der Statoren dreht, falls die Richtung des angelegten Feldes zu der des Dipols des Rotors entgegengesetzt ist. Nachdem das Molekül in eine bestimmte Orientierung geschaltet wurde, bleibt es in dieser Orientierung, bis es ausgeschaltet wird. Jedoch besteht eine Schlüsselkomponente des Molekülentwurfs darin, dass eine sterische Abstoßung vorliegt, die verhindert, dass sich der Rotor um einen vollständigen Halbzyklus von 180 Grad dreht. Stattdessen wird die Drehung durch die sterische Interaktion von voluminösen Gruppen an dem Rotor und den Statoren in einem Winkel, der etwa 90 Grad von der anfänglichen Orientierung abweicht, angehalten. Ferner wird diese 90Grad-Orientierung durch einen anderen Satz von inter- und/oder in-

tramolekularen Wasserstoffbrückenbindungen oder Dipol-Interaktionen stabilisiert und somit sogar nach Abschaltung des angelegten Feldes in die richtige Position eingerastet. Für Schaltermoleküle ist diese Fähigkeit, den Rotor zwischen zwei Zuständen einrasten zu lassen, die von den Statoren um etwa 90 Grad getrennt sind, entscheidend.

[0046] Im Idealfall, bezüglich der Orientierung, bei der der Rotor und die Statoren allesamt koplanar sind, wird das Molekül vollständig konjugiert. Somit werden die p, π -Elektronen des Moleküls durch sein höchstes besetztes Molekülorbital (HOMO – highest occupied molecular orbital) und sein niedrigstes unbesetztes Molekülorbital (LUMO – lowest unoccupied molecular orbital) über das gesamte Molekül hinweg delokalisiert. Dies ist ein Hohe-Leitfähigkeit-Zustand (Schalter-EIN-Zustand) für das Molekül. In dem Fall, in dem der Rotor bezüglich der Statoren um 90 Grad gedreht wird, wird die Konjugation des Moleküls gelöst, und das HOMO und das LUMO werden nicht mehr über das gesamte Molekül hinweg delokalisiert. Dies ist der Geringe-Leitfähigkeit-Zustand (Schalter-AUS-Zustand) des Moleküls. Somit ist das Molekül zwischen dem EIN- und dem AUS-Zustand reversibel schaltbar.

[0047] Die folgenden Anforderungen müssen bei diesem Stator-Rotor-Stator-Modell erfüllt sein:

- (a) Das Molekül muss ein Rotor- und zwei Statorsegmente aufweisen;
- (b) Bei einem Zustand des Moleküls sollten delokalisierte HOMOs und/oder LUMOs (π -Zustände und/oder nichtbindende Orbitale) vorliegen, die sich über einen großen Teil des gesamten Moleküls (Rotor und Statoren) erstrecken, wohingegen in dem anderen Zustand die Orbitale an dem Rotor und den Statoren lokalisiert sind;
- (c) Die Verbindungseinheit zwischen Rotor und jedem Stator kann eine σ -Einfachbindung oder zumindest ein Atom mit (1) nichtbindenden Elektronen (p - oder anderen Elektronen) oder (2) π -Elektronen oder (3) π -Elektronen und (einem) nichtbindenden Elektron(en) sein;
- (d) Die nichtbindenden Elektronen oder π -Elektronen oder π -Elektronen und das bzw. die nichtbindende(n) Elektron(en) des Rotors und der Statoren können je nach der Konformation des Moleküls lokalisiert oder delokalisiert werden, während sich der Rotor dreht, wenn er durch ein elektrisches Feld aktiviert wird;
- (e) Die Konformation(en) des Moleküls kann bzw. können E-Feld-abhängig oder bistabil sein;
- (f) Der bzw. die bistabile(n) Zustand bzw. Zustände kann bzw. können durch Intra- oder Intermolekularkräfte wie z.B. eine Wasserstoffbrückenbindung, eine Coulomb-Kraft, van-der-Waals-Kraft, Metallionenkomplex oder Dipol-Interstabilisation erreicht werden; und
- (g) Der Bandabstand des Moleküls ändert sich in Abhängigkeit von dem Grad der Nichtbindendes-Elektron- oder π -Elektron- oder π -Elektron- und Nichtbindendes-Elektron-Delokalisierung des Moleküls. Dies verändert die elektrischen Eigenschaften, z.B. die elektrische Leitfähigkeit, des Moleküls.

[0048] Es folgen zwei Beispiele dieses Modells (Beispiele 1 und 2):

Die neuartigen bimodalen Moleküle der vorliegenden Erfindung sind aktive elektrische Vorrichtungen, die mit einem externen elektrischen Feld geschaltet werden können. Die Grundidee besteht darin, in die Moleküle ein drehbares Mittelsegment (Rotor) **32** hineinzuentwerfen, das ein großes Dipol-Moment aufweist (siehe Beispiele 1 und 2) und das zwei andere Abschnitte des Moleküls **30**, die immobilisiert sind (Statoren) **34**, verbindet, wie in [Fig. 2](#) veranschaulicht ist. Unter dem Einfluss eines angelegten elektrischen Feldes versucht das Vektor-Dipol-Moment des Rotors **32**, sich parallel zu der Richtung des externen Feldes auszurichten. Jedoch ist das Molekül **30** so entworfen, dass Inter- und/oder Intramolekularkräfte, z.B. Wasserstoffbrückenbindungen oder Dipol-Dipol-Interaktionen sowie sterische Abstoßungen vorliegen, die den Rotor **32** in bestimmten Orientierungen bezüglich der Statoren **34** stabilisieren. Somit ist ein großes elektrisches Feld erforderlich, um zu bewirken, dass sich der Rotor **32** aus seiner anfänglichen Orientierung löst und bezüglich der Statoren **34** dreht.

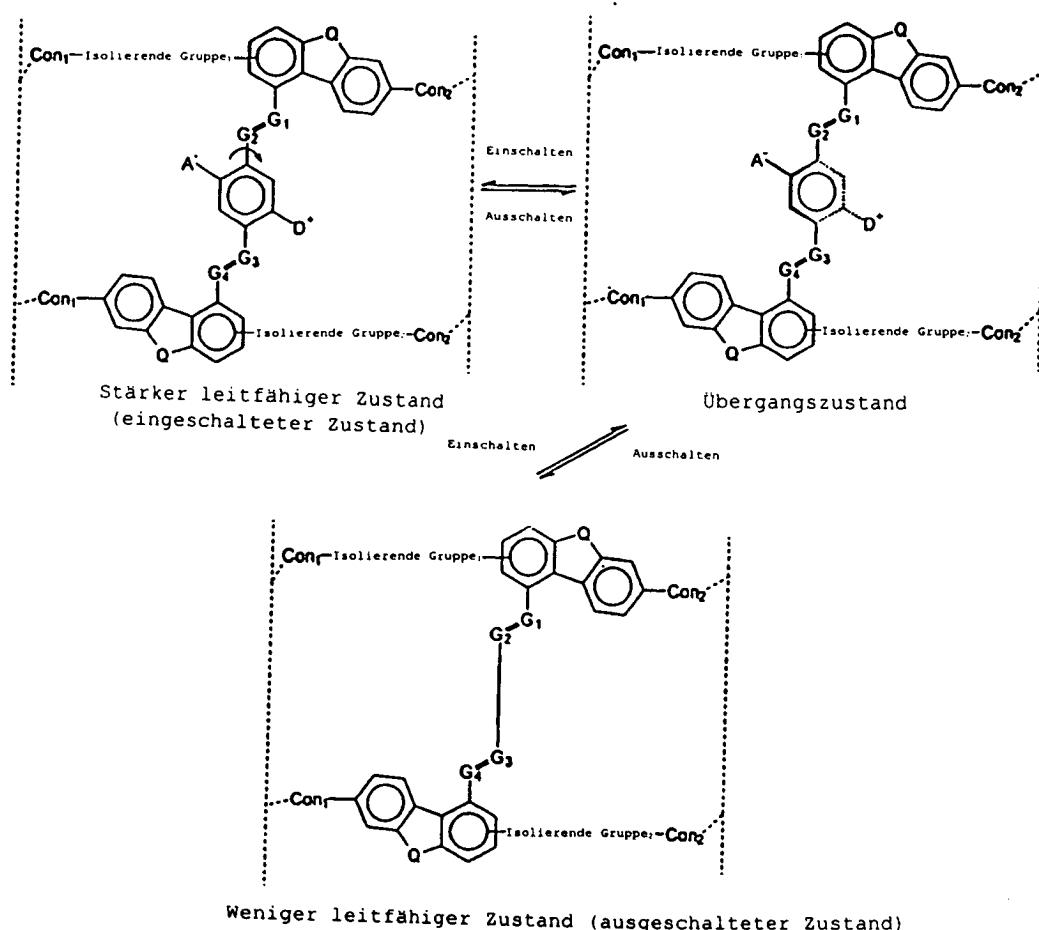
[0049] Nachdem das Molekül **30** in eine bestimmte Orientierung geschaltet wurde, bleibt es in dieser Orientierung, bis es zu einer anderen Orientierung geschaltet oder rekonfiguriert wird. Jedoch besteht eine Schlüsselkomponente des Molekülentwurfs darin, dass eine sterische Abstoßung oder Hinderung vorliegt, die verhindert, dass sich der Rotor **32** um einen vollständigen Halbzyklus von 180 Grad dreht. Stattdessen wird die Drehung durch die sterische Interaktion von voluminösen Gruppen an dem Rotor **32** und den Statoren **34** in einem elektrisch bedeutsamen Winkel, der üblicherweise um zwischen 10 Grad und 170 Grad von der anfänglichen Orientierung abweicht, angehalten. Für Veranschaulichungszwecke ist dieser Winkel bei der vorliegenden Anmeldung als 90 Grad gezeigt. Ferner kann diese Schaltorientierung durch einen anderen Satz von inter- und/oder intramolekularen Wasserstoffbrückenbindungen oder Dipol-Interaktionen stabilisiert werden und wird somit sogar nach Abschaltung des angelegten Feldes in der richtigen Position eingerastet. Für bistabile Schaltermoleküle ist diese Fähigkeit, den Rotor **32** zwischen zwei Zuständen einrasten zu lassen, die durch eine elektrisch bedeutsame Drehung von den Statoren getrennt sind, entscheidend.

[0050] Wenn der Rotor **32** und die Statoren **34** allesamt koplanar sind, wird das Molekül als „stärker konjugiert“ bezeichnet. Somit werden die nichtbindenden Elektronen bzw. π -Elektronen oder die π -Elektronen und die nichtbindenden Elektronen des Moleküls durch dessen höchstes besetztes Molekularorbital (HOMO) und dessen niedrigstes unbesetztes Molekularorbital (LUMO) über einen Großteil des Moleküls **30** hinweg delokalisiert. Dies wird als „stärker leitfähiger Zustand“ für das Molekül bzw. als „elektrischer Zustand I“ bezeichnet. In dem Fall, in dem der Rotor **32** bezüglich der Statoren **34** um etwa 10 Grad bis 170 Grad aus der Konjugation herausgedreht wird, wird die Konjugation des Moleküls **30** gelöst, und das HOMO und das LUMO werden über kleinere Abschnitte des Moleküls hinweg lokalisiert, was als „weniger stark konjugiert“ bezeichnet wird. Dies ist ein „weniger stark leitfähiger Zustand“ des Moleküls **30** bzw. ein „elektrischer Zustand II“. Somit ist das Molekül **30** zwischen zwei verschiedenen elektrischen Zuständen auf reversible Weise schaltbar.

[0051] Fachleuten wird einleuchten, dass im Idealfall, wenn der Rotor **32** und die Statoren **34** vollständig koplanar sind, das Molekül vollständig konjugiert ist, und wenn der Rotor **32** bezüglich der Statoren **34** um einen Winkel von 90 Grad gedreht ist, so ist das Molekül nicht-konjugiert. Auf Grund von Wärmeschwankungen werden diese Idealzustände jedoch nicht vollständig verwirklicht, und das Molekül wird somit im erstgenannten Fall als „stärker konjugiert“ und im zuletzt genannten Fall als „weniger stark konjugiert“ bezeichnet.

[0052] Beispiele 1 und 2 zeigen zwei unterschiedliche Orientierungen zum Schalten der Moleküle. Bei Beispiel 1 ist die Drehungsachse des Rotors dahin gehend entworfen, nahezu senkrecht zu der Nettostrom führenden Achse der Moleküle zu sein, wohingegen die Drehungsachse bei Beispiel 2 parallel zu der Orientierungsachse des Moleküls ist. Diese Entwürfe ermöglichen, dass unterschiedliche Geometrien von Molekularfilmen und Elektroden verwendet werden, je nach den gewünschten Ergebnissen. Für jedes Beispiel werden sowohl generische als auch reale Molekularstrukturen präsentiert. Beispiele 1a und 2a sind generische Molekularstrukturen, um zwei unterschiedliche Orientierungen zum Schalten der Moleküle zu zeigen, und Beispiele 1b und 2b sind zwei reale Molekularstrukturen.

[0053] Unter Bezugnahme zunächst auf das Beispiel 1 zeigt dasselbe ein erstes Ausführungsbeispiel des bistabilen molekularen mechanischen Bauelements der vorliegenden Erfindung. Das nachstehende Beispiel 1a zeigt eine generische Molekularimplementierung für das Stator-Rotor-Stator-Modell.



Beispiel 1a

wobei

der Buchstabe A⁻ eine Akzeptorgruppe darstellt; sie ist eine elektronenziehende Gruppe (relativ zu der Donatorgruppe). Sie kann eine(s) der Folgenden sein: Carbonsäure oder ihre Derivate, Sulfursäure oder ihre Derivate, Phosphorsäure oder ihre Derivate, Nitro, Nitril, Heteroatome (z.B. N, O, S, P, F, Cl und Br) oder funktionelle Gruppe mit zumindest einem der oben erwähnten Heteroatome (z.B. OH, SH, NH usw.), Kohlenstoff (ungesättigt) oder substituierter Kohlenstoff.

[0054] Der Buchstabe D⁺ eine Donatorgruppe darstellt; sie ist eine elektronenspendende Gruppe (relativ zu der Akzeptorgruppe). Sie kann eine(s) der Folgenden sein: Wasserstoff, Amin, OH, SH, Ether, Kohlenwasserstoff (entweder gesättigt oder ungesättigt) oder substituierter Kohlenwasserstoff oder eine funktionelle Gruppe mit zumindest einem Heteroatom (z.B. B, Si, N, O, S, P, I). Der Donator wird von dem Akzeptor dadurch unterschieden, dass er weniger stark elektronegativer bzw. elektropositiver ist als die Akzeptorgruppe an dem Molekül.

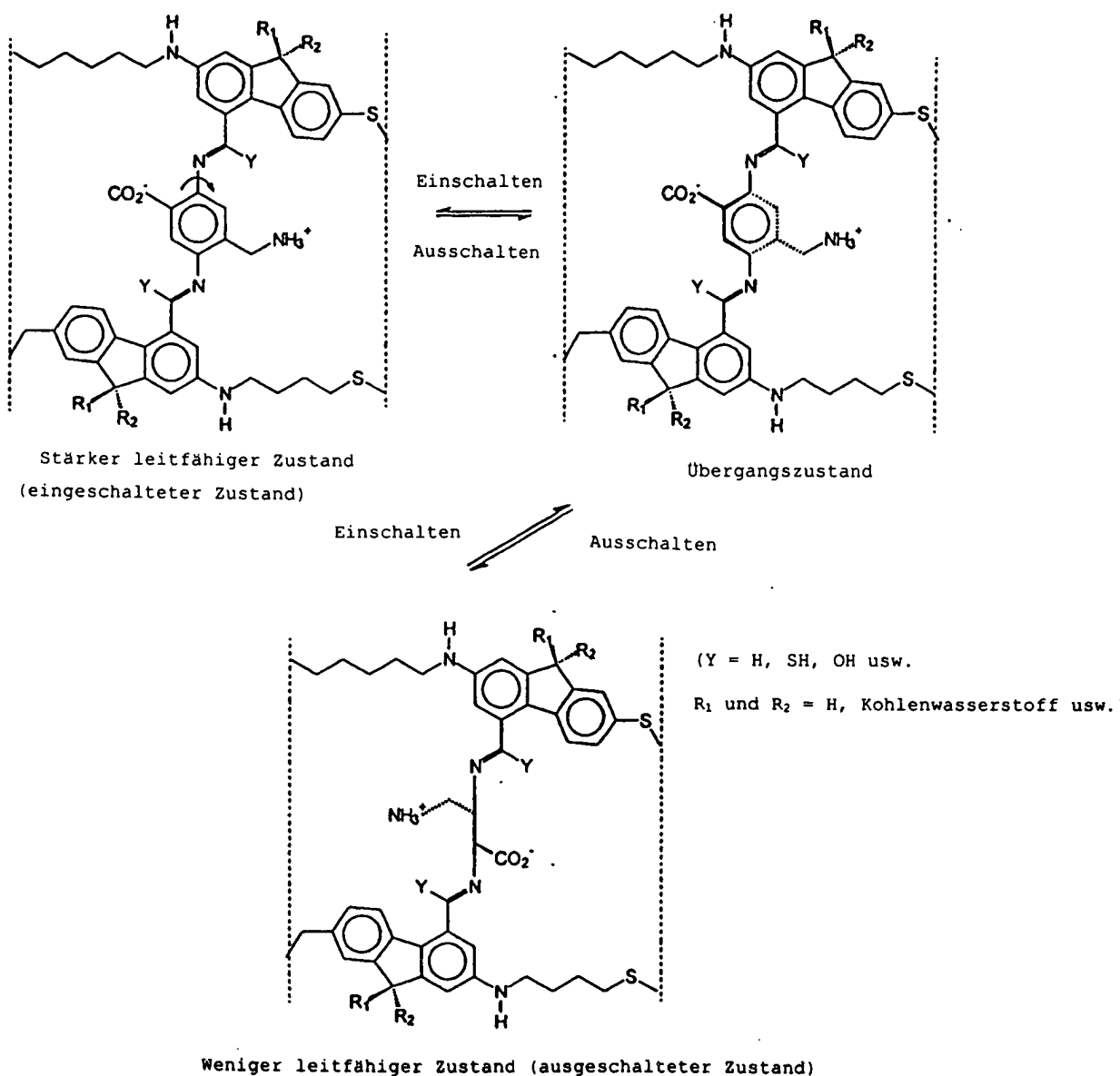
[0055] Die Buchstaben Con₁ und Con₂ Verbindungseinheiten zwischen einem Molekül und dem Feststoffsubstrat (z.B. Metallelektrode, anorganisches oder organisches Substrat usw.) darstellen. Sie können Beliebige der Folgenden sein Wasserstoff (unter Verwendung einer Wasserstoffbrückenbindung), mehrwertige Heteroatome (d.h. C, N, O, S, P usw.) oder funktionelle Gruppen, die diese Heteroatome enthalten (z.B. NH, PH usw.), Kohlenwasserstoffe (entweder gesättigt oder ungesättigt) oder substituierte Kohlenwasserstoffe.

[0056] Die Buchstaben G₁, G₂, G₃ und G₄ Brücken bildende Gruppen sind. Die Funktion dieser Brücken bildenden Gruppen besteht darin, den Stator und Rotor zu verbinden oder zwei oder mehr konjugierte Ringe zu verbinden, um eine gewünschte elektronische Eigenschaft zu erzielen. Sie können ein Beliebige der Folgenden sein: Heteroatome (z.B. N, O, S, P usw.) oder funktionelle Gruppen mit zumindest einem von oben erwähnten Heteroatomen (z.B. NH oder NHNH usw.), Kohlenwasserstoffe (entweder gesättigt oder ungesättigt) oder substituierte Kohlenwasserstoffe. Der Verbinden kann alternativ eine Einzelatombrücke wie z.B. eine Etherbrücke mit einem Sauerstoffatom oder eine direkte Sigma-Bindung zwischen dem Rotor und Stator umfassen.

[0057] Der Buchstabe Q hier dazu verwendet wird, eine Verbindungseinheit zwischen zwei Phenylringen zu bezeichnen. Er kann eines der Folgenden sein: S, O, NH, NR, Kohlenwasserstoff oder substituierter Kohlenwasserstoff.

[0058] Bei dem obigen Beispiel 1a stellen die vertikalen gepunkteten Linien andere Moleküle oder Festkörpersubstrate dar. Die Richtung des Schaltfelds ist zu den vertikalen gepunkteten Linien senkrecht. Eine derartige Konfiguration wird zum elektrischen Schalten verwendet, und das Molekül kann einfach zwischen die zwei Elektroden platziert werden.

[0059] Das nachstehende Beispiel 1b ist ein reales molekulares Beispiel des oben erwähnten Stator-Rotor-Stator-Modells:



Beispiel 1b

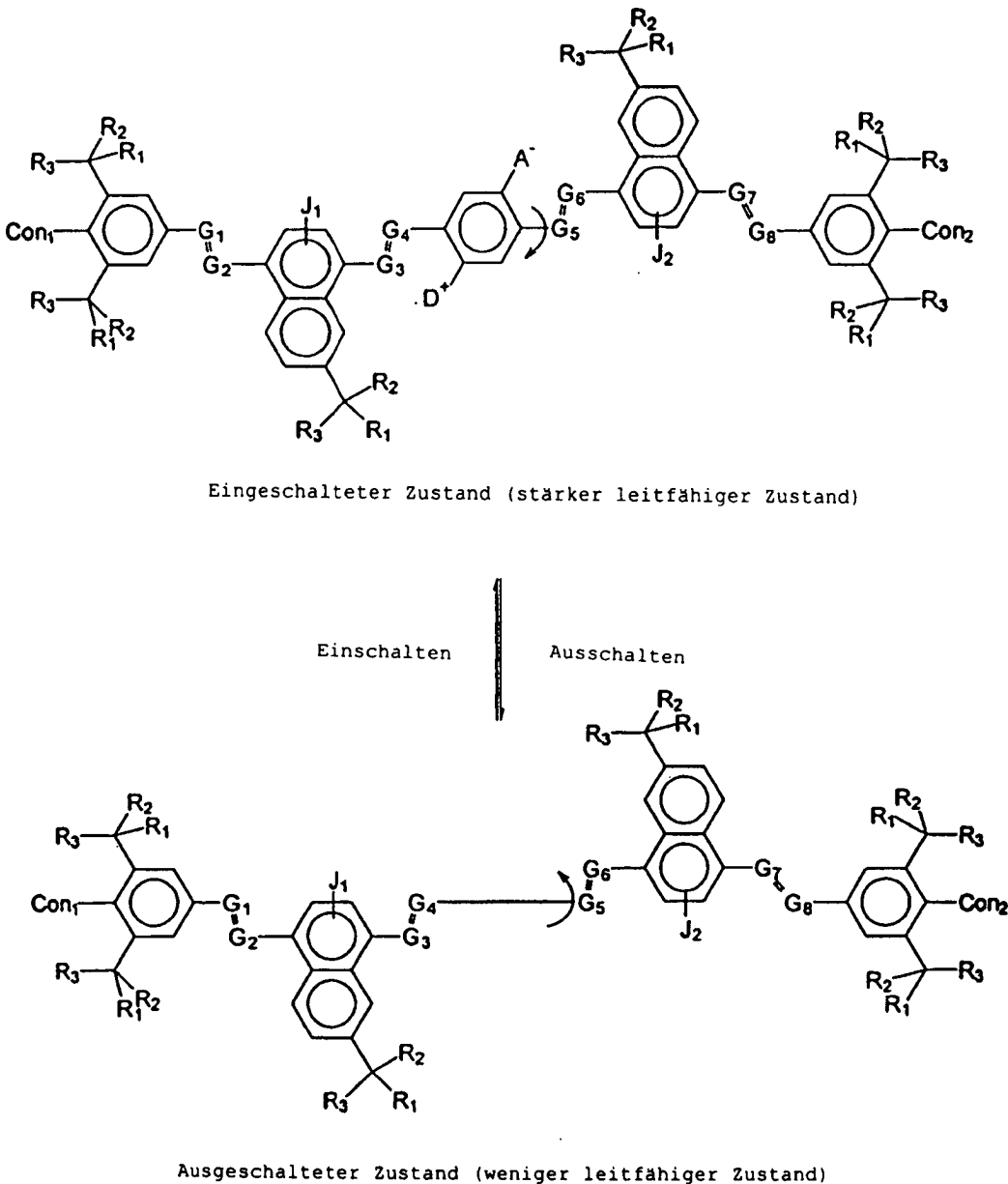
[0060] Das oben gezeigte Molekül (Beispiel 1b) wurde so entworfen, dass der innere Rotor **32** zu der Orientierung oder der Stromflussachse des gesamten Moleküls **30** senkrecht ist. In diesem Fall wird das externe Feld entlang der Orientierungsachse des Moleküls angelegt, wie dargestellt ist – die Elektroden (vertikale gepunktete Linien) sind senkrecht zu der Ebene des Papiers und senkrecht zu der Orientierungsachse des Moleküls **30** orientiert. Ein Anlegen eines elektrischen Feldes, das in den Diagrammen von links nach rechts orientiert ist, bewirkt, dass sich der Rotor **32**, wie er in dem oberen linken Diagramm gezeigt ist, zu der auf dem unteren Diagramm gezeigten Position dreht, und umgekehrt. In diesem Fall ist der Rotor **32**, wie er in dem unteren Diagramm gezeigt ist, nicht koplanar zu dem restlichen Molekül, so dass dies der AUS- oder Gerin-

ge-Leitfähigkeit-Zustand des Moleküls ist, wohingegen der Rotor in dem oberen linken Diagramm im Wesentlichen koplanar zu dem restlichen Molekül ist, so dass dies der EIN- oder Hohe-Leitfähigkeit-Zustand des Moleküls ist. Die in dem oberen rechten Diagramm gezeigte Struktur zeigt den Drehungsübergangszustand zwischen dem oberen linken Diagramm (koplanar, konjugiert) und dem unteren Diagramm (mittlerer Abschnitt gedreht, nicht-konjugiert).

[0061] Das in Beispiel 1 gezeigte Molekül ist in dem nicht-konjugierten Zustand nicht-leitfähig (oder vergleichsweise geringfügig leitfähig). Im konjugierten Zustand ist das Molekül leitfähig.

[0062] Bezüglich Molekülen des in Beispiel 1 gezeigten Typs wird ein einziger Monoschicht-Molekularfilm gewachsen, beispielsweise unter Verwendung von Langmuir-Blodgett-Techniken oder sich selbst organisierenden Monoschichten, so dass die Orientierungsachse der Moleküle senkrecht zu der Ebene der Elektroden ist, die zum Schalten der Moleküle verwendet werden. Elektroden können auf die von Collier et al., supra, beschriebene Weise oder anhand von Verfahren, die in den oben aufgeführten Patentanmeldungen und der erteilten Patentschrift beschrieben sind, aufgebracht werden.

[0063] Nun sei auf Beispiel 2 verwiesen, das ein zweites Ausführungsbeispiel des bistabilen molekularen mechanischen Bauelements der vorliegenden Erfindung darstellt. Das nachstehende Beispiel 2a zeigt ein zweites generisches molekulares Beispiel der Stator-Rotor-Stator-Konfiguration der vorliegenden Erfindung.



Beispiel 2a

wobei

der Buchstabe A⁻ eine Akzeptorgruppe darstellt; sie ist eine elektronenziehende Gruppe (relativ zu der Donatorgruppe). Sie kann eine(s) der Folgenden sein: Carbonsäure oder ihre Derivate, Sulfursäure oder ihre Derivate, Phosphorsäure oder ihre Derivate, Nitro, Nitril, Heteroatome (z.B. N, O, S, P, F, Cl und Br) oder funktionelle Gruppe mit zumindest einem der oben erwähnten Heteroatome (z.B. OH, SH, NH usw.), Kohlenstoff (ungesättigt) oder substituierter Kohlenstoff.

[0064] Der Buchstabe D⁺ eine Donatorgruppe darstellt; sie ist eine elektronenspendende Gruppe (relativ zu der Akzeptorgruppe). Sie kann eine(s) der Folgenden sein: Wasserstoff, Amin, OH, SH, Ether, Kohlenwasserstoff (entweder gesättigt oder ungesättigt) oder substituierter Kohlenwasserstoff oder eine funktionelle Gruppe mit zumindest einem Heteroatom (z.B. B, Si, N, O, S, P). Der Donator wird von dem Akzeptor dadurch unterschieden, dass er weniger stark elektronegativer bzw. elektropositiver ist als die Akzeptorgruppe an dem Molekül.

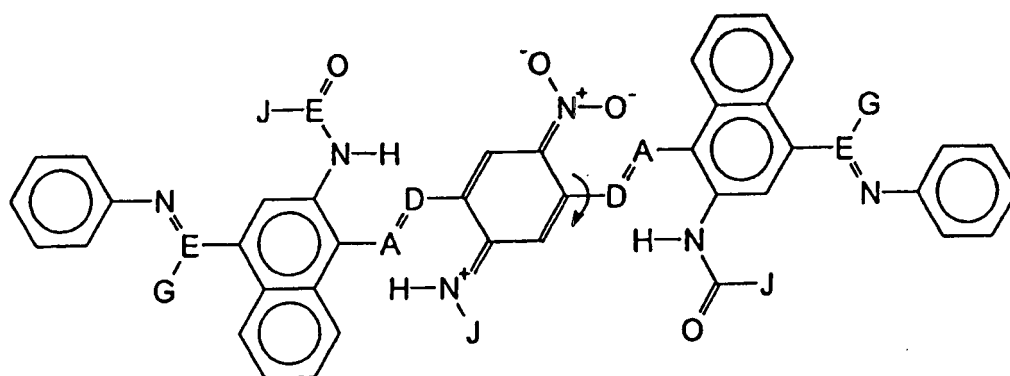
[0065] Die Buchstaben Con₁ und Con₂ Verbindungseinheiten zwischen einem Molekül und einem anderen Molekül oder zwischen einem Molekül und dem Feststoffsubstrat (z.B. Metallelektrode, anorganisches oder organisches Substrat usw.) darstellen. Sie können Beliebige der Folgenden sein: Wasserstoff (unter Verwendung einer Wasserstoffbrückenbindung), mehrwertige Heteroatome (d.h. C, N, O, S, P usw.) oder funktionelle Gruppen, die diese Heteroatome enthalten (z.B. NH, PH usw.), Kohlenwasserstoffe (entweder gesättigt oder ungesättigt) oder substituierte Kohlenwasserstoffe.

[0066] Die Buchstaben R₁, R₂ und R₃ Beabstandungsgruppen darstellen, die in das Molekül eingebaut sind. Die Funktion dieser Abstandshaltereinheiten besteht darin, ein entsprechendes 3-dimensionales Gerüst bereitzustellen, um es den Molekülen zu ermöglichen, miteinander gepackt zu werden, und dabei einen Rotationsraum für jeden Rotor zu liefern. Sie können eines der Folgenden sein: Wasserstoff, Kohlenwasserstoff (entweder gesättigt oder ungesättigt) oder substituierter Kohlenwasserstoff.

[0067] Die Buchstaben G₁, G₂, G₃, G₄, G₅, G₆, G₇ und G₈ Brücken bildende Gruppen sind. Die Funktion dieser Brücken bildenden Gruppen besteht darin, den Stator und Rotor zu verbinden oder zwei oder mehr konjugierte Ringe zu verbinden, um eine gewünschte elektronische Eigenschaft zu erzielen. Sie können eines der Folgenden sein: Heteroatome (z.B. C, N, O, S, P usw.) oder eine funktionelle Gruppe mit zumindest einem der oben erwähnten Heteroatome (z.B. NH oder NHNH usw.), Kohlenwasserstoffe (entweder gesättigt oder ungesättigt) oder substituierte Kohlenwasserstoffe. Der Verbinder kann alternativ dazu eine Einzelatombrücke wie z.B. eine Etherbrücke mit einem Sauerstoffatom oder eine direkte Sigma-Bindung zwischen dem Rotor und Stator umfassen.

[0068] Die Buchstaben J₁ und J₂ Abstimmgruppen darstellen, die in das Molekül eingebaut sind. Die Funktion dieser Abstimmgruppen (z.B. OH, NHR, COOH, CN, Nitro usw.) besteht darin, einen entsprechenden funktionellen Effekt (z.B. sowohl einen induktiven Effekt als auch Resonanzeffekte) und/oder sterische Effekte zu liefern. Der funktionelle Effekt besteht darin, den Bandabstand ($\Delta E_{\text{HOMO/LUMO}}$) des Moleküls dahin gehend abzustimmen, die gewünschten elektronischen Eigenschaften des Moleküls zu erhalten. Der sterische Effekt besteht darin, die Molekularkonformation durch eine sterische Hinderung, inter- oder intramolekulare Interaktionskräfte (z.B. Wasserstoffbrückenbindung, Coulomb-Interaktion, van-der-Waals-Kräfte) abzustimmen oder eine Bi- oder Mehrfach-Stabilität von Molekularorientierungen zu liefern. Sie können Beliebige der Folgenden sein: Wasserstoff, Heteroatome (z.B. N, O, S, P, B, F, Cl, Br und I), funktionelle Gruppen mit zumindest einem von oben erwähnten Heteroatomen, Kohlenwasserstoffe (entweder gesättigt oder ungesättigt) oder substituierte Kohlenwasserstoffe.

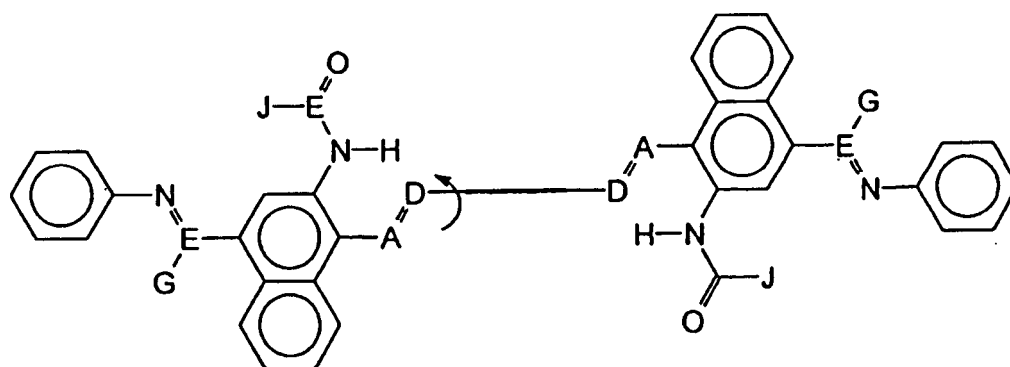
[0069] Das nachfolgende Beispiel 2b ist ein reales molekulares Beispiel der oben erwähnten Stator-Rotor-Stator-Konfiguration:



Stärker leitfähiger Zustand (eingeschalteter Zustand)

Einschalten

Ausschalten



Weniger leitfähiger Zustand (ausgeschalteter Zustand)

Beispiel 2b

[0070] Das oben gezeigte Molekül (Beispiel 2b) wurde so entworfen, dass der interne Rotor parallel zu der Orientierungsachse des gesamten Moleküls ist. In diesem Fall wird das externe Feld senkrecht zu der Molekularachse angelegt – die Elektroden sind parallel zu der Längsachse des Moleküls orientiert und können zu der Ebene der obigen Modellstrukturen entweder senkrecht oder parallel sein. Beispielsweise bewirkt ein Anlegen eines elektrischen Feldes an das oben gezeigte obere Molekül dort, wo die Feldlinien senkrecht zu der Molekularachse sind und nach oben zeigen, dass sich der Rotor, wie er in diesem Diagramm dargestellt ist, zu etwa 90 Grad dreht und edge-on erscheint, wie in dem obigen unteren Molekular diagramm gezeigt ist, und umgekehrt. In diesem Fall ist der Rotor gemäß der Darstellung in dem unteren Diagramm nicht koplanar zu dem restlichen Molekül, so dass dies der AUS- oder der Geringe-Leitfähigkeit-Zustand des Moleküls ist, wohingegen der Rotor in dem oberen Diagramm koplanar zu dem restlichen Molekül ist, so dass dies der EIN-Zustand bzw. der Hohe-Leitfähigkeit-Zustand des Moleküls ist. In dem Diagramm geben die Buchstaben A, D, E, G und J Stellen an, wo verschiedene chemische Einheiten dazu verwendet werden können, die geometrische Struktur des Moleküls anzupassen, und andere chemische Gruppen ebenfalls als Rotor und Statoren verwendet werden können. (Die Buchstaben N, H und O behalten ihre übliche Bedeutung bei.) Die Buchstaben A, D, E, G und J können Beliebige der Folgenden sein: Heteroatome (z.B. N, O, S, P usw.), Kohlenwasserstoff (entweder gesättigt oder ungesättigt) oder Kohlenwasserstoff mit zumindest einem der oben erwähnten Heteroatome. Zusätzlich zu dem Vorstehenden können die Buchstaben G und J Beliebige der folgenden Heteroatome sein: Wasserstoff, F, Cl, Br, I usw.

[0071] Bezüglich der Moleküle des Beispiels 2 werden die Filme derart gewachsen, dass die Molekularachse parallel zu der Ebene der Elektroden ist. Dies kann Filme beinhalten, die mehrere Monoschichten dick sind. Die Moleküle bilden Festkörper- oder Flüssigkristalle, bei denen die großen Statorgruppen mittels intermole-

kularer Interaktionen oder einer Direktbindung an eine Trägerstruktur in eine Position eingerastet werden, der Rotor jedoch klein genug ist, um sich innerhalb des Gitters der Moleküle zu bewegen. Bei der ordnungsgemäßen Orientierung von Elektroden kann diese Struktur dazu verwendet werden, einen gattergesteuerten Übergang (Transistor) zu erzeugen; d.h. einen, bei dem eine an eine Elektrode angelegte Spannung den Strom steuern kann, der zwischen zwei anderen Elektroden fließt, die durch die Moleküle überbrückt werden.

[0072] Obwohl in den Beispielen 2a und 2b keine Verbindereinheiten gezeigt sind, würden derartige Verbindereinheiten, z.B. -S-, in den Beispielen 1a und 1b gezeigt, dazu verwendet werden, das Molekül zwischen ein Paar von Elektroden zu schalten, wie in Beispiel 1 gezeigt ist. Im Einzelnen erfolgt die Verbindung zwischen den Statorabschnitten des Moleküls und den Elektroden.

[0073] Beispiele 1 und 2 zeigen zwei unterschiedliche Orientierungen zum Schalten der Moleküle. Jedoch sollen die gelieferten Beispiele nicht so angesehen werden, als würden sie die Erfindung auf die veranschaulichten spezifischen Molekularsysteme beschränken, sondern sie sind als lediglich beispielhaft für den hierin offenbarten und beanspruchten Schaltmechanismus anzusehen.

[0074] Somit stellt die Erfindung einen neuen Typ eines Schaltmechanismus vor, der sie von dem Stand der Technik unterscheidet, nämlich eine durch ein elektrisches Feld („E-Feld“) bewirkte Drehung eines drehbaren Abschnitts (Rotors) eines Moleküls, um den Bandabstand des Moleküls zu verändern. Im Gegensatz zu Lösungsansätzen des Standes der Technik wird das Molekül beim Kippen des Schalters niemals oxidiert oder reduziert. Außerdem ist der Teil des Moleküls, der sich bewegt, ziemlich klein, so dass mit einer ziemlich schnellen Schaltzeit gerechnet wird. Ferner sind die Moleküle viel einfacher und somit leichter und kostengünstiger herzustellen als die Rotaxane, Catenane und verwandten Verbindungen.

[0075] Die hierin offenbarte und beanspruchte Technologie zum Bilden überkreuzter Drähte (Mikrometer oder Nanometer) kann dazu verwendet werden, eine Vielzahl von Funktionen zu erfüllen und eine Vielzahl nützlicher Vorrichtungen und Schaltungen zum Implementieren eines Rechnens im Mikrobereich und sogar im Nanobereich zu bilden. Beispielsweise umfassen Anwendungen Molekulardrahtkreuzschienenverbindungen (MWCI – molecular wire crossbar interconnects) zur Signalwegleitung und für Kommunikationen, Molekulardrahtkreuzschienenspeicher (US-Patentschrift 6,128,214), Molekulardrahtkreuzschienenlogik (MWCL – molecular wire crossbar logic), die programmierbare Logikarrays, einen Demultiplexer für ein Molekulardrahtkreuzschienennetzwerk, Molekulardrahttransistoren und Pixelarrays für Anzeigen verwenden.

[0076] Wie in [Fig. 3](#) veranschaulicht ist, kann der Schalter **10** der vorliegenden Erfindung in einem zweidimensionalen Array repliziert werden, um eine Mehrzahl bzw. ein Array **60** von Schaltern zu bilden, um einen Kreuzschienenschalter zu bilden. [Fig. 3](#) zeigt ein 6x6-Array **60**, jedoch ist die Erfindung nicht auf die bestimmte Anzahl von Elementen oder Schaltern in dem Array beschränkt. Ein Zugang zu einem einzigen Punkt, z.B. 2b, erfolgt, indem an den Drähten **2** und **b** eine Spannung eingeprägt wird, um eine Veränderung des Zustands der molekularen Spezies **18** an dem Übergang bzw. Verbindungspunkt derselben zu bewirken, wie oben beschrieben wurde. Somit ist ein Zugang zu jedem Übergang ohne weiteres verfügbar, um lediglich diese vorausgewählten Übergänge gemäß den Lehren des vorliegenden Dokuments zu konfigurieren. Einzelheiten der Funktionsweise des Kreuzschienenschalterarrays **60** sind in der oben angeführten US-Patentschrift 6,128,214 näher erörtert.

INDUSTRIELLE ANWENDBARKEIT

[0077] Man erwartet, dass die hierin offenbarten Feld-schaltbaren Moleküle bei im Mikrobereich und im Nanobereich liegenden elektronischen Bauelementen Anwendung finden.

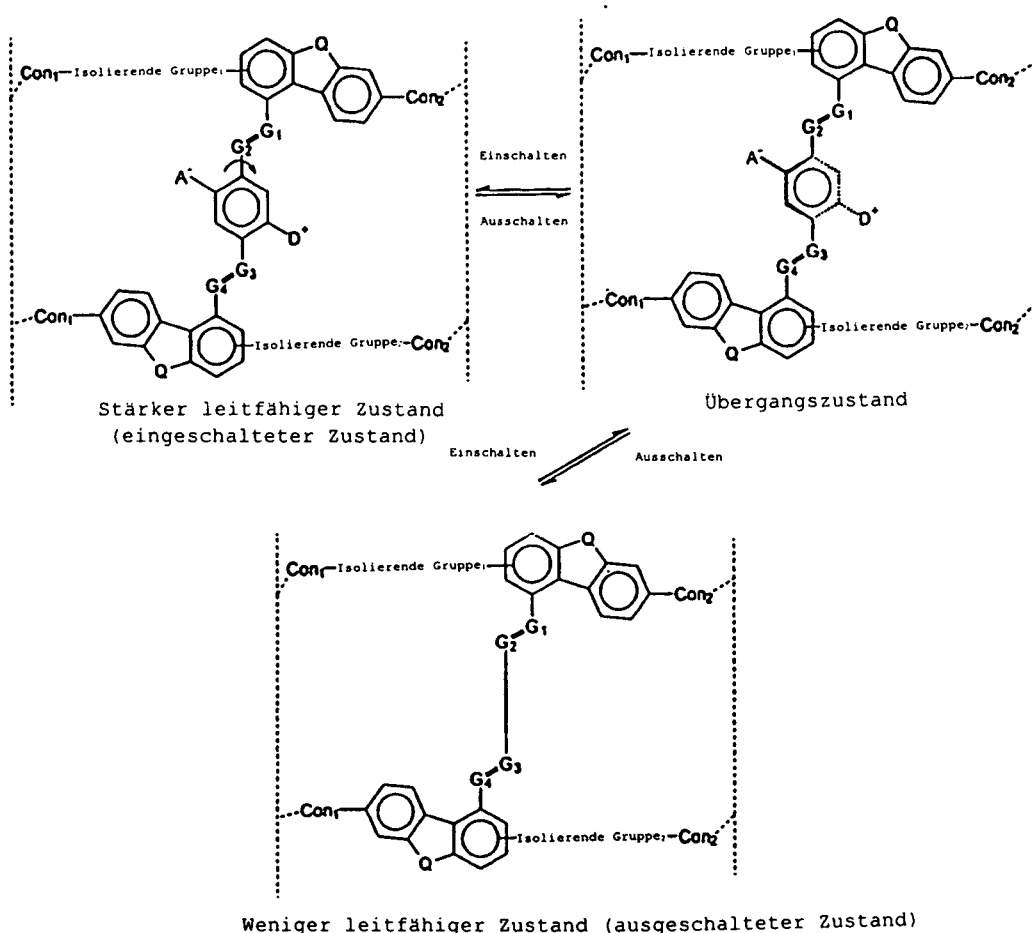
Patentansprüche

1. Eine bistabile nicht-Redox-getriebene Konformationsstruktur-schaltbare molekulare mechanische Vorrichtung (**60**), gekennzeichnet durch ein Molekularsystem (**30**), das in einem durch ein Paar von Elektroden (**12**, **14**) erzeugten elektrischen Feld konfiguriert und entweder damit chemisch verbunden oder physisch daran angelagert ist, wobei das Molekularsystem (**30**) einen Rotorabschnitt (**32**) aufweist, der kovalent zwischen zwei Statorabschnitten (**34**) verbunden ist, wobei sich der Rotorabschnitt (**32**) auf ein Anlegen des elektrischen Feldes hin bezüglich der Statorabschnitte (**34**) zwischen zwei verschiedenen molekularen Konformationszuständen dreht, wodurch eine Veränderung des Bandabstands in dem Molekularsystem (**30**) bewirkt wird, wobei in einem ersten molekularen Konformationszustand eine erweiterte Konjugation über zumindest einen Großteil des Molekularsystems (**30**) vorliegt, was zu einem relativ geringeren Bandabstand führt, und wobei in einem

zweiten molekularen Konformationszustand die erweiterte Konjugation verändert wird, was zu einem relativ größeren Bandabstand führt.

2. Die Molekularvorrichtung (60) gemäß Anspruch 1, bei der das Molekularsystem (30) eine Orientierungsachse aufweist und bei der der Rotorabschnitt (32) senkrecht zu der Orientierungsachse orientiert ist, wobei das externe elektrische Feld parallel zu der Orientierungsachse angelegt ist.

3. Die Molekularvorrichtung (60) gemäß Anspruch 2, bei der das Molekularsystem (30) folgende Merkmale umfasst:



wobei

A⁻ eine Akzeptorgruppe ist, die eine elektronenziehende Gruppe (relativ zu der Donatorgruppe) umfasst, die aus der aus Folgenden bestehenden Gruppe ausgewählt ist: (a) Carbonsäure und ihren Derivaten, (b) Schwefelsäure und ihren Derivaten, (c) Phosphorsäure und ihren Derivaten, (d) Nitro, (e) Nitril, (f) Heteroatomen, die aus der aus N, O, S, P, F, Cl und Br bestehenden Gruppe ausgewählt sind, (g) funktionellen Gruppen mit zumindest einem der Heteroatome, (h) ungesättigten Kohlenwasserstoffen und (i) substituierten Kohlenwasserstoffen;

D⁺ eine Donatorgruppe ist, die eine elektronenspendende Gruppe (relativ zu der Akzeptorgruppe) umfasst, die aus der aus Folgenden bestehenden Gruppe ausgewählt ist: (a) Wasserstoff, (b) Aminen, (c) OH, (d) SH, (e) Ethern, (f) gesättigten oder ungesättigten Kohlenwasserstoffen, (h) substituierten Kohlenwasserstoffen und (i) funktionellen Gruppen mit zumindest einem Heteroatom, das aus der aus B, Si, N, O, S, P und I bestehenden Gruppe ausgewählt ist, wobei die Donatorgruppe elektropositiver ist als die Akzeptorgruppe;

Con₁ und Con₂ Verbindungseinheiten zwischen einem Molekül und einem Feststoffsubstrat sind, das aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus einer Metallelektrode, einem anorganischen Substrat und einem organischen Substrat besteht, wobei die Verbindungseinheiten unabhängig voneinander aus der aus Folgenden bestehenden Gruppe ausgewählt sind: (a) Wasserstoff (unter Verwendung einer Wasserstoffbrückenbindung), (b) mehrwertigen Heteroatomen, die aus der aus C, N, O, S und P bestehenden Gruppe ausgewählt sind, (c) funktionellen Gruppen, die die Heteroatome enthalten, (d) gesättigten oder ungesättigten Kohlenwasserstoffen und (e) substituierten Kohlenwasserstoffen;

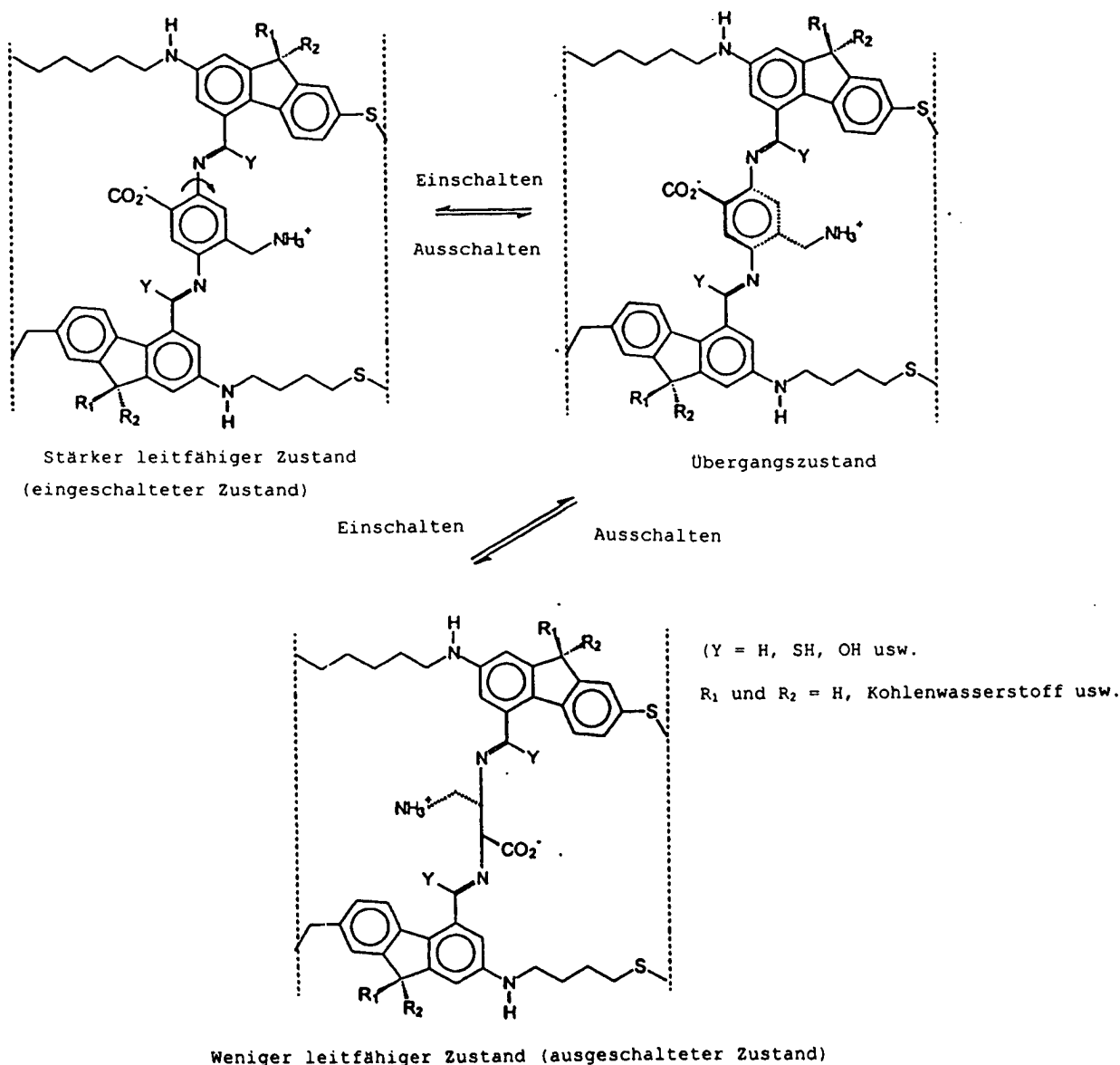
G₁, G₂, G₃ und G₄ Brücken bildende Gruppen zum Verbinden des Stators mit jedem Rotor oder zum Verbinden zweier oder mehrerer konjugierter Ringe zum Erzielen einer gewünschten elektronischen Eigenschaft sind,

wobei die Brücken bildenden Gruppen aus der aus Folgenden bestehenden Gruppe ausgewählt sind: (a) Heteroatomen, die aus der aus N, O, S und P bestehenden Gruppe ausgewählt sind, (b) funktionellen Gruppen mit zumindest einem der Heteroatome, (c) gesättigten oder ungesättigten Kohlenwasserstoffen, (d) substituierten Kohlenwasserstoffen, (e) einer Einzelatombrücke und (f) einer direkten Sigmabindung zwischen dem Rotor und jedem Stator; und

Q eine Verbindungseinheit zwischen zwei Phenylringen ist und aus der aus Folgenden bestehenden Gruppe ausgewählt ist: (a) S, (b) O, (c) NH, (d) NR, (e) Kohlenwasserstoff und (f) substituiertem Kohlenwasserstoff, und

wobei die vertikalen gestrichelten Linien das Feststoffsubstrat darstellen, an das das Molekül elektrisch angelagert ist.

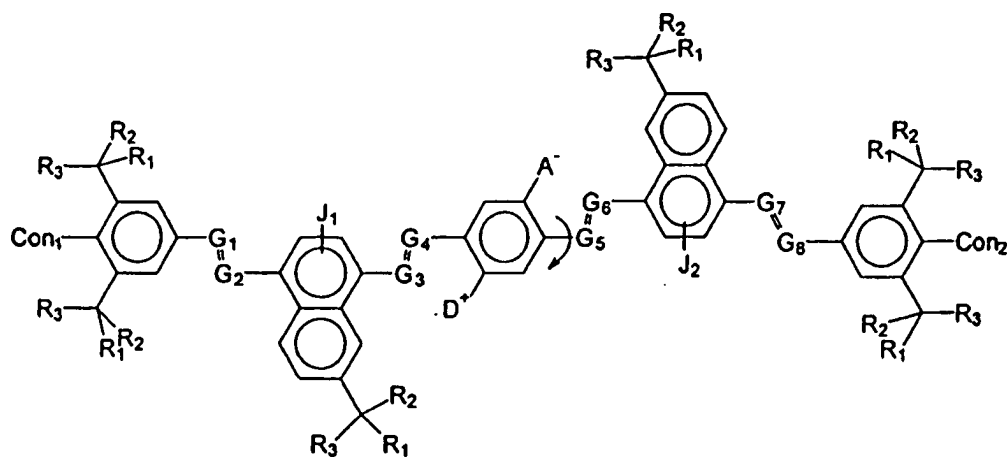
4. Die Molekularvorrichtung (60) gemäß Anspruch 3, bei der das Molekularsystem (30) folgende Merkmale umfasst:



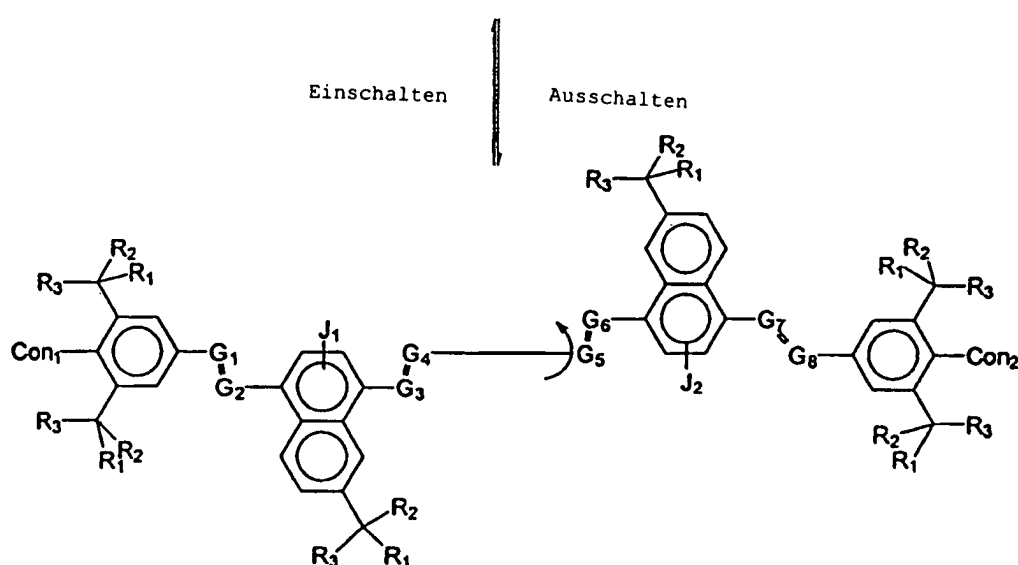
wobei R₁ und R₂ unabhängig voneinander Wasserstoff oder Kohlenwasserstoff sind; und Y aus der aus Wasserstoff, OH und SH bestehenden Gruppe ausgewählt ist.

5. Die Molekularvorrichtung (60) gemäß Anspruch 1, bei der das Molekularsystem (30) eine Orientierungsachse aufweist und bei der der Rotorabschnitt (32) parallel zu der Orientierungsachse orientiert ist, wobei das externe elektrische Feld senkrecht zu der Orientierungsachse angelegt ist.

6. Die Molekularvorrichtung (60) gemäß Anspruch 5, bei der das Molekularsystem (30) folgende Merkmale aufweist:



Eingeschalteter Zustand (stärker leitfähiger Zustand)



Ausgeschalteter Zustand (weniger leitfähiger Zustand)

wobei:

A^- eine Akzeptorgruppe ist, die eine elektronenziehende Gruppe (relativ zu der Donatorgruppe) umfasst, die aus der aus Folgenden bestehenden Gruppe ausgewählt ist: (a) Carbonsäure und ihren Derivaten, (b) Sulfursäure und ihren Derivaten, (c) Phosphorsäure und ihren Derivaten, (d) Nitro, (e) Nitril, (f) Heteroatomen, die aus der aus N, O, S, P, F, Cl und Br bestehenden Gruppe ausgewählt sind, (g) funktionellen Gruppen mit zumindest einem der Heteroatome, (h) ungesättigten Kohlenwasserstoffen und (i) substituierten Kohlenwasserstoffen;

D^+ eine Donatorgruppe ist, die eine elektronenspendende Gruppe (relativ zu der Akzeptorgruppe) umfasst, die aus der aus Folgenden bestehenden Gruppe ausgewählt ist: (a) Wasserstoff, (b) Amin, (c) OH, (d) SH, (e) Ethern, (f) gesättigten oder ungesättigten Kohlenwasserstoffen, (g) substituierten Kohlenwasserstoffen und (i) funktionellen Gruppen mit zumindest einem Heteroatom, das aus der aus B, Si, N, O, S, P und I bestehenden Gruppe ausgewählt ist, wobei die Donatorgruppe elektropositiver ist als die Akzeptorgruppe;

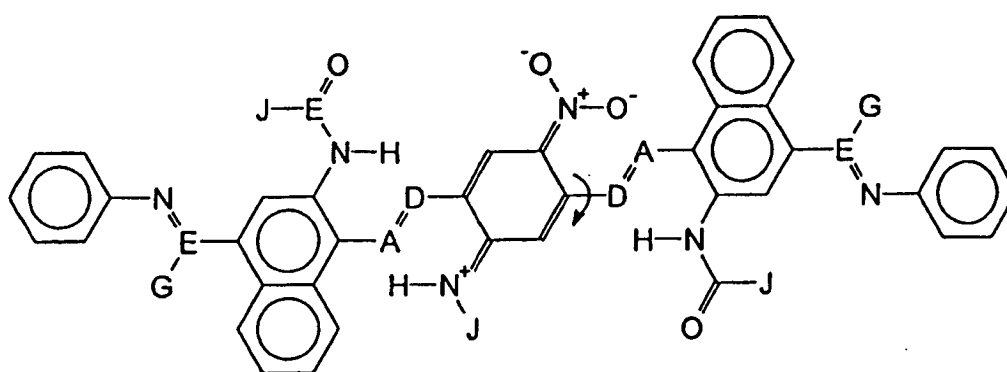
Con_1 und Con_2 Verbindungseinheiten zwischen einem Molekül und einem anderem Molekül oder zwischen einem Molekül und einem Feststoffsubstrat sind, das aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus einer Metallelektrode, einem anorganischen Substrat und einem organischen Substrat besteht, wobei die Verbindungseinheiten unabhängig voneinander aus der aus Folgenden bestehenden Gruppe ausgewählt sind: (a) Wasserstoff (unter Verwendung einer Wasserstoffbrückenbindung), (b) mehrwertigen Heteroatomen, die aus der aus C, N, O, S und P bestehenden Gruppe ausgewählt sind, (c) funktionellen Gruppen, die die Heteroatome enthalten, (d) gesättigten oder ungesättigten Kohlenwasserstoffen und (e) substituierten Kohlenwasserstoffen;

R_1 , R_2 und R_3 Beabstandungsgruppen zum Bereitstellen eines entsprechenden 3-dimensionalen Gerüsts, um es Molekülen zu ermöglichen, miteinander gepackt zu werden, und dabei einen Rotationsraum für jeden Rotor

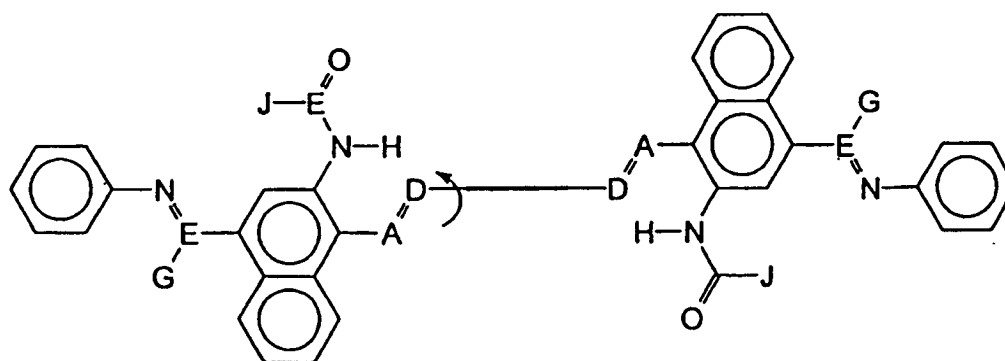
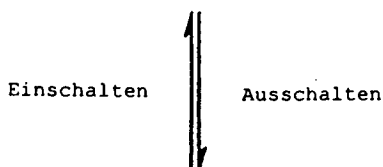
liefern, wobei die Beabstandungsgruppen aus der aus Folgenden bestehenden Gruppe ausgewählt sind: (a) Wasserstoff, (b) gesättigtem oder ungesättigtem Kohlenwasserstoff und (c) substituiertem Kohlenwasserstoff; $G_1, G_2, G_3, G_4, G_5, G_6, G_7$ und G_8 Brücken bildende Gruppen zum Verbinden des Stators mit jedem Rotor oder zum Verbinden zweier oder mehrerer konjugierter Ringe zum Erzielen einer gewünschten elektronischen Eigenschaft sind, wobei die Brücken bildenden Gruppen aus der aus Folgenden bestehenden Gruppe ausgewählt sind: (a) Heteroatomen, die aus der aus N, O, S und P bestehenden Gruppe ausgewählt sind, (b) funktionellen Gruppen mit zumindest einem der Heteroatome, (c) gesättigten oder ungesättigten Kohlenwasserstoffen, (d) substituierten Kohlenwasserstoffen, (e) einer Einzelatombrücke und (f) einer direkten Sigmabindung zwischen dem Rotor und jedem Stator; und

J_1 und J_2 Abstimmgruppen sind, um zumindest einen geeigneten funktionellen Effekt zu liefern, der aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus induktiven Effekten, Resonanzeffekten und sterischen Effekten besteht, wobei die Abstimmgruppen aus der aus Folgenden bestehenden Gruppe ausgewählt sind: (a) Wasserstoff, (b) aus der aus N, O, S, P, B, F, Cl, Br und I bestehenden Gruppe ausgewählten Heteroatomen, (c) funktionellen Gruppen mit zumindest einem der Heteroatome, (d) gesättigten oder ungesättigten Kohlenwasserstoffen und (e) substituierten Kohlenwasserstoffen.

7. Die Molekularvorrichtung (60) gemäß Anspruch 6, bei der das Molekularsystem (30) folgende Merkmale aufweist:



Stärker leitfähiger Zustand (eingeschalteter Zustand)



Weniger leitfähiger Zustand (ausgeschalteter Zustand)

wobei die Buchstaben A, D, E, G und J Stellen angeben, wo unterschiedliche chemische Einheiten verwendet werden können, um eine geometrische Struktur und optische Eigenschaften des Molekularsystems anzupassen, und folgende generische Bezeichnungen aufweisen: A, D, E, G und J sind unabhängig voneinander aus der Gruppe ausgewählt, die aus Heteroatomen, Kohlenwasserstoffen (entweder gesättigt oder ungesättigt) und Kohlenwasserstoffen mit zumindest einem der Heteroatome besteht, und wobei zusätzlich zu dem Vorstehenden die Buchstaben G und J unabhängig voneinander aus der aus Wasserstoff, F, Cl, Br und I bestehenden

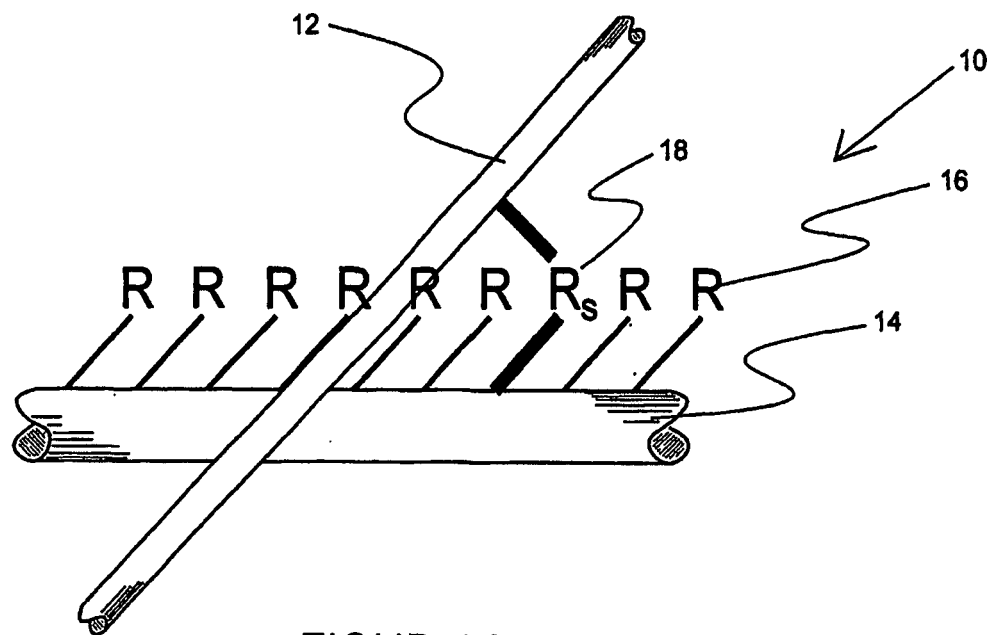
Gruppe ausgewählt sind.

8. Die Molekularvorrichtung (**60**) gemäß Anspruch 1, die eine über Kreuz verdrahtete Vorrichtung (**10**) umfasst, die ein Paar von überkreuzten Drähten (**12, 14**) umfasst, die einen Verbindungspunkt (**18**) bilden, wo ein Draht (**14**) einen anderen (**12**) in einem Winkel, der nicht null Grad beträgt, kreuzt, und zumindest eine chemische funktionelle Gruppe (**16**), die das Paar von überkreuzten Drähten (**12, 14**) in dem Verbindungspunkt (**18**) verbindet, wobei der Verbindungspunkt (**18**) eine funktionelle Abmessung in Nanometern aufweist, wobei die zumindest eine chemische funktionelle Gruppe (**16**) das Molekularsystem (**30**) umfasst.

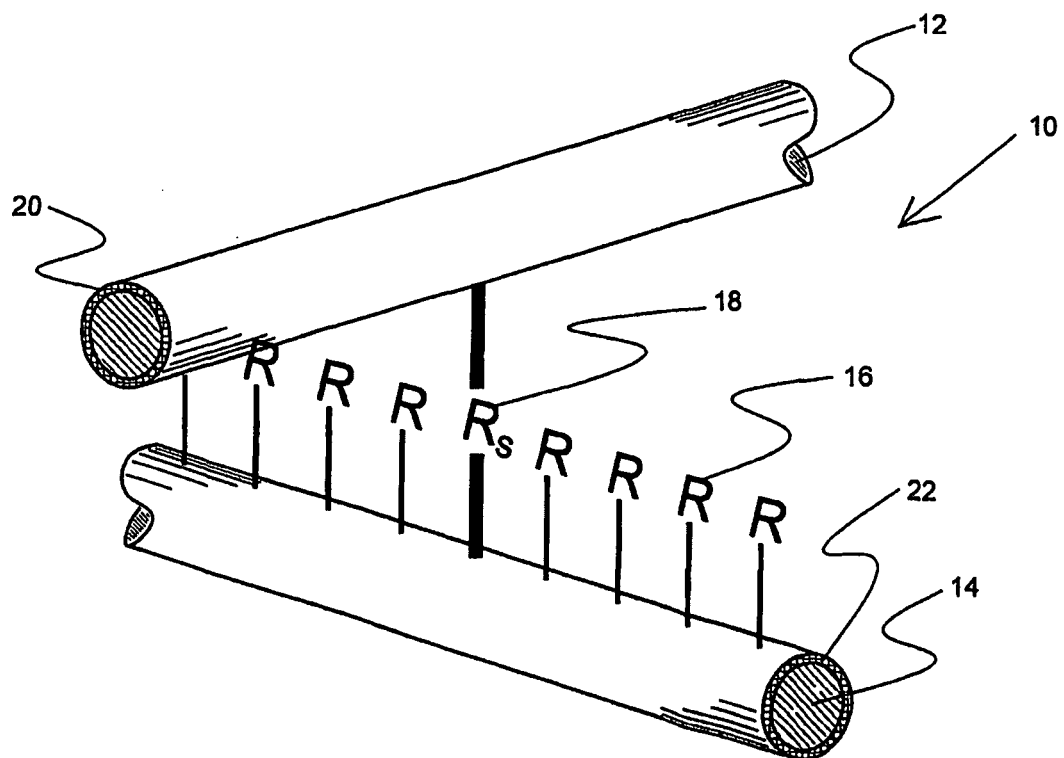
9. Die Molekularvorrichtung (**60**) gemäß Anspruch 8, bei der die über Kreuz verdrahtete Vorrichtung (**10**) aus der Gruppe ausgewählt ist, die aus Speichern, Logikvorrichtungen, Multiplexern, Demultiplexern, konfigurierbaren Verbindungen für integrierte Schaltungen, feldprogrammierbaren Gatterarrays (FPGAs), Kreuzschienenschaltern und Kommunikationsvorrichtungen besteht.

10. Die Molekularvorrichtung (**60**) gemäß Anspruch 1, bei der das Molekularsystem (**30**) mittels chemischer funktioneller Gruppen mit dem Paar von Elektroden (**12, 14**) verbunden ist.

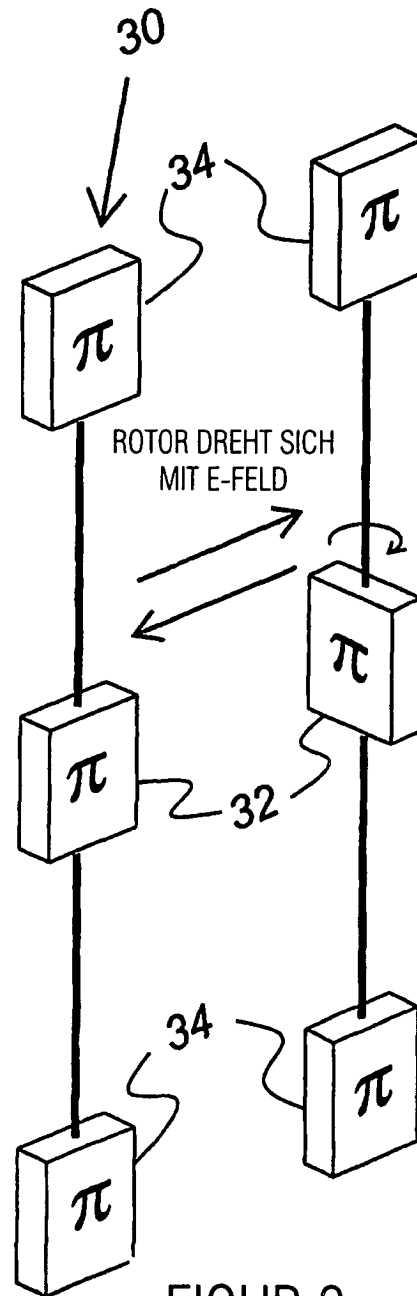
Es folgen 3 Blatt Zeichnungen



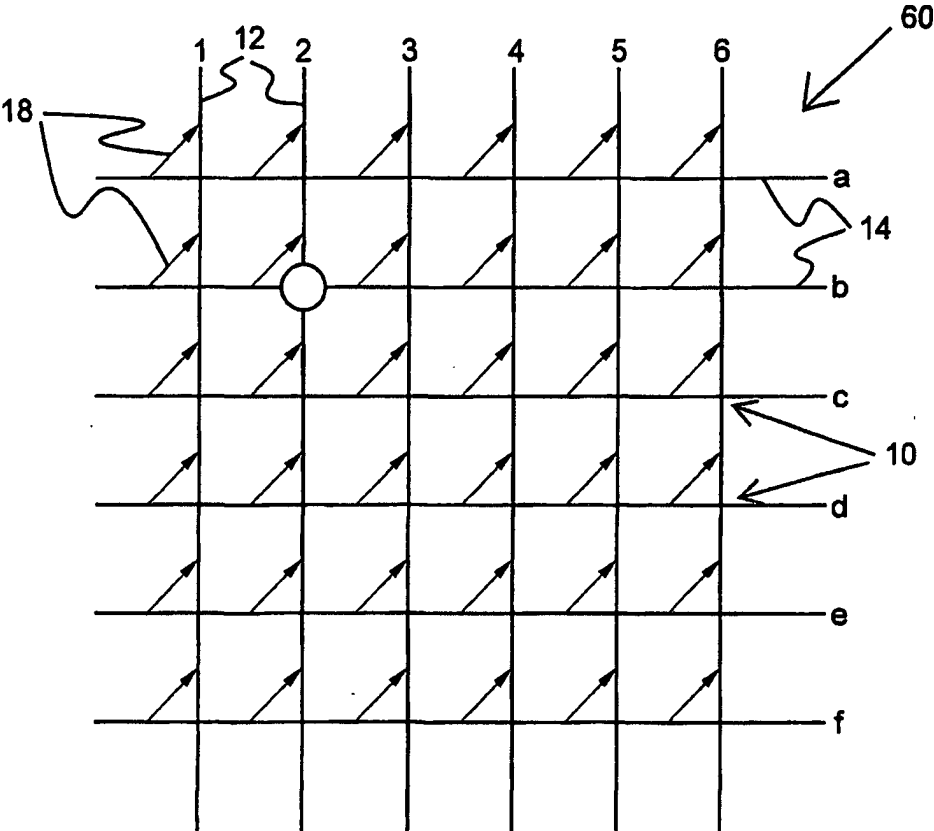
FIGUR 1A



FIGUR 1B



FIGUR 2



FIGUR 3