Тезисы для доклада на

Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2024»

**Анализ поляризационных и диссипативных свойств серии органических соединений смешанной валентности, включающей окисленный норборнадиен и его циклические производные, и перспектив их использования в качестве ячеек молекулярных квантовых клеточных автоматов**

**Белонович В.Л.1ab, Палий А.В. 2b**

1студент, 2*г.н.с. д.ф.-м.н.*

aМосковский физико-технический институт (НИУ), Москва, Россия
bФедеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия
E–mail: *belonovich.vl@phystech.edu*

Развитие современных полупроводниковых технологий сталкивается с проблемой увеличения теплопотерь при миниатюризации устройств. В связи с этим в настоящее время активно разрабатываются альтернативные технологии, относящиеся к области молекулярной электроники. Так была предложена концепция молекулярных квантовых клеточных автоматов (ККА) [1]. Основным элементом ККА - устройств является молекулярная бистабильная ячейка, позволяющая кодировать двоичную информацию в двух зарядовых конфигурациях (поляризациях) ячейки. Как правило, такая ячейка представляет собой молекулу смешанной валентности (СВ), обладающую требуемыми свойствами. Передача информации от ячейки к ячейке осуществляется с помощью кулоновского взаимодействия между ячейками. Таким образом, структуры, состоящие из нескольких ячеек, способны передавать и обрабатывать информацию и на их основе можно создавать логические вентили, провода, инвертеры и другие устройства, способные заменить традиционные устройства на основе полевых транзисторов.

Ключевыми требованиями к ячейке ККА являются сильный нелинейный отклик на внешнее электростатическое поле, а также низкое тепловыделение, приходящееся на один цикл переключения. Последнее требование связано с тем, что из-за малых (молекулярных) размеров ячеек, плотность их размещения оказывается очень высокой, поэтому суммарная диссипация мощности может быть весьма существенной, ограничивая возможность выполнения операций с высокими скоростями переключения.

С точки зрения проблемы рационального дизайна молекулярных ячеек ККА, весьма привлекательной стратегией является изучение серий однотипных соединений СВ, в которых один из ключевых параметров системы контролируемым образом меняется внутри данной серии.

В данной работе анализируются свойства серии органических соединений СВ, включающей окисленный норборнадиен [C7H8]+ и его полициклические производные [C12H12]+, [C17H16]+, [C27H24]+ и [C32H28]+. В этой серии последовательно увеличивается длина мостика между окислительно-восстановительными центрами, что существенно влияет на параметр электронного переноса.

Соединения рассматриваются в рамках двухмодовой модели для димера СВ [2]. В модели учитываются электронный перенос, внешнее электростатическое поле, а также вибронное взаимодействие с двумя типами молекулярных колебаний, а именно, с антисимметричным колебанием, составленным из локальных полносимметричных колебаний окислительно-восстановительных центров, и межцентровым колебанием, меняющим расстояния между центрами. В рамках этой модели для каждого соединения рассчитывался отклик ячейки на электрическое поле, создаваемое соседний поляризованной ячейкой. Также для важного предельного случая мгновенного неадиабатического переключения для каждого соединения были оценены значения теплопотерь за один цикл переключения.

Проведенный анализ поляризационных и диссипативных свойств соединений данной серии показал, что наиболее перспективными с точки зрения использования в качестве молекулярных ячеек ККА являются соединения [C27H24]+ и [C32H28]+ с самыми длинными мостиками, которые демонстрируют сильную локализацию избыточного заряда, и, соответственно, сильный отклик даже при очень слабых полях (т. е. при больших расстояниях между ячейками), позволяющих, в свою очередь, минимизировать теплопотери.

Работа частично выполнена при финансовой поддержке госзадания №124013100858-3 и частично при поддержке РНФ (грант № 20-13-00374-Π).

**Литература**

1. Lent C.S., Isaksen B., Lieberman M. Molecular Quantum-Dot Cellular Automata // J.Am.Chem.Soc. 2003, 125, 1056-1063.
2. Palii A., Aldoshin S., Zilberg S. и Tsukerblat B., A parametric two-mode vibronic model of a dimeric mixed-valence cell for molecular quantum cellular automata and computational ab initio verification // Phys. Chem. Chem. Phys., 2020, 22, 44, 25 982—25 999.