

## Молекулярний транзистор на основі заміщених дифенілу

Малашенко Г.Г.<sup>1</sup>, студ.; Лопаткін Ю.М.<sup>1</sup>, проф.;  
Кондратенко П.О.<sup>2</sup>, проф.

<sup>1</sup> Сумський державний університет, м. Суми

<sup>2</sup> Національний авіаційний університет, м. Київ

Сучасні комп'ютери набули стрімкого розвитку. З часом елементна база буде мініатюризована до розмірів молекули. Робота направлена на вивчення переносу електрона через молекулу, закріплену між двома електродами. Використовувати слід стабільні молекули, які мають дві конформації.

Дослідження проводились з молекулою дифенілу з різними замісниками.

Розгляд молекули дифенілу з замісником  $\text{NO}_2$  показав, що величиною кута між фенільними кільцями можна управляти за допомогою зовнішнього неоднорідного електричного поля малої величини. Але однорідне електричне поле дає значно кращі результати. Величина кута збільшується при вмиканні зовнішнього однорідного поля незалежно від полярності поля.

Спроба вирішити цю ж задачу з використанням точкового заряду  $\text{BF}_4^-$  не дали гарного результату: поле дало зміщення лише  $0,15^\circ$ . При накладенні однорідного поля при збільшенні напруженості електричного поля в позитивному напрямку молекула руйнується.

Молекули можна використовувати в режимі транзистора (рис. 1), проте чутливість до однорідного електричного поля  $\text{NO}_2$ -дифенілу суттєво перевищує чутливість  $\text{Cl}$ -дифенілу (для однакової величини поля  $E = 0,01$  ат. од. приблизно в 6 разів). Проте, у випадку  $\text{Cl}$ -дифенілу є можливість встановити кут між фенільними фрагментами  $90^\circ$ . А отже суттєво розширюються можливості застосування цієї молекули в режимі польового транзистора.

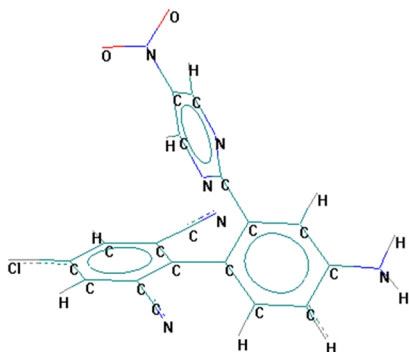


Рисунок 1 – Модель транзистора на основі молекули дифенілу.