

Вплив електричного поля на молекулу дифенілу з замісником NO₂

Малашенко Г.Г., *студент*; Павлюк М., *студент*;
Лопаткін Ю.М., *професор*; Кондратенко П.О., *професор*
Сумський державний університет, м. Суми
Національний авіаційний університет, м. Київ

Одним з актуальних завдань молетроніки є пошук і створення молекулярних структур, які в результаті самоорганізації набувають необхідних досліднику властивостей і зможуть в подальшому відігравати роль елементів електронних схем, наприклад, молекулярного транзистора. У випадку молекули дифенілу це може здійснюватися, коли під впливом електричного поля кільця молекули дифенілу повертаються один відносно іншого на деякий кут, щоб завдяки збільшенню перекриття π -орбіталей двох фенільних кілець збільшити ймовірність переносу електричного заряду через молекулу.

Результати розрахунку молекули дифенілу з замісником R=NO₂ представлені в табл.1. Початковий кут без поля виявився близьким до 90°, а кут повороту між фенільними кільцями при накладанні електричного поля виявився аномально великим, що можна пояснити зміною дипольного моменту молекули у результаті перерозподілу заряду, що в свою чергу приводить до відносного повороту фенільних кілець.

Таблиця 1 – Залежність енергії зв'язку W_{\min} молекули, мінімального кута між фенільними кільцями φ_{\min} та різниці між цими кутами та кутом без поля $\Delta\varphi$ від напруженості електричного поля E

E , В/нм	W_{\min} , еВ	φ_{\min} , град.	$\Delta\varphi= \varphi-\varphi_{\min} $
12,85	-144,92	71,8881	17,2992
10,28	-142,38	81,2468	7,9405
5,14	-141,08	82,7801	6,4072
0	-140,44	89,1873	0
-5,14	-140,93	93,8176	4,6303
-10,28	-142,25	101,491	12,3037
-12,85	-143,14	108,176	18,9887