

## Елемент пам'яті на основі молекули пероксиду

П.О. Кондратенко<sup>1</sup>, Ю.М. Лопаткін<sup>2</sup>, А.Г. Малашенко<sup>2</sup>, Т.М. Сакун<sup>1</sup>, А.Є. Маринченко<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Національний авіаційний університет, пр. Комарова, 1, 03680 Київ, Україна

<sup>2</sup> Сумський державний університет, вул. Римського-Корсакова, 2, 40007 Суми, Україна

(Одержано 20.09.2017, у відредагованій формі – 25.11.2017, опубліковано online 24.02.2018)

Робота присвячена вивченню можливості використання окремих молекул пероксиду загальної формули  $R_1-O-O-R_2$  як елементів інтегральних схем. В результаті проведених досліджень було показано, що ці молекули характеризуються двоюмною потенціальною поверхнею при зміні величини двогранного кута  $R_1-O-O-R_2$ . При цьому дипольний момент симетричних заміщених молекул пероксиду направлений перпендикулярно до зв'язку O-O від його середини вздовж бісектриси між напрямками R-O зв'язків. При прикладанні зовнішнього однорідного електричного поля, направлено вздовж O-O зв'язку, двоюмна потенціальна поверхня стає несиметричною, що зумовлює перехід від однієї конформації молекули до іншої, змінюючи напрям дипольного моменту на протилежний. Проте, таке поле не здатне впорядковувати дипольні моменти різних молекул. Останнє вдається досягти при прикладанні неоднорідного електричного поля, направлено вздовж дипольного моменту молекули. З іншого боку, несиметричні молекули з простими замісниками під дією зовнішнього електричного поля можуть змінювати лише напрям оптичної активності. Використання великих молекулярних фрагментів як замісників приводить до втрати чутливості молекул до зовнішнього електричного поля.

**Ключові слова:** Молекулярний перемикач, Нанофізика, Потенціальна поверхню, Потенціальний бар'єр, Вплив електричного поля, Дипольний момент.

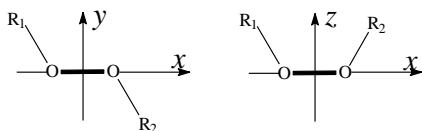
DOI: [10.21272/jnep.10\(1\).01026](https://doi.org/10.21272/jnep.10(1).01026)

PACS numbers: 31.15.-p, 31.15.Ct+, 33.15.Dj+, 33.15.Hp +, 33.20.Sn

### 1. ВСТУП

Розвиток комп'ютерної техніки і мініатюризація її елементів вже поставили питання про можливість використання окремих молекул як елементів інтегральних схем. Це зумовило появу низки наукових досліджень, направлених на вивчення властивостей молекул, які можна було б використати для виготовлення молекулярних елементів пам'яті, перемикачів, транзисторів тощо [1-5]. Крім того, в кожному конкретному випадку потрібно знайти методи зовнішнього впливу на вказані елементи, які б привели до потрібного результату.

В серії наукових праць авторів [6, 7] було показано, що енергетична структура пероксидів з загальною формулою молекули (в двох проєкціях)



характеризуються двоюмною потенціальною поверхнею при зміні величини двогранного кута  $R_1-O-O-R_2$ . При цьому перехід від однієї потенціальної ями до іншої може супроводжуватись зміною напрямку дипольного моменту молекули на протилежний. Використання таких молекул в інтегральних схемах вимагає надійної фіксації напрямку дипольного моменту молекули і регульованого перемикачання цього напрямку.

Крім того, пероксиди являються оптично активними молекулами і перехід від однієї потенціальної ями до іншої супроводжується зміною знаку оптичної активності.

У зв'язку з цим в даній публікації автори вивча-

ли можливість взаємоперетворень між двома конфігураціями в цих молекулах, поміщених в зовнішнє електричне поле, з метою розробки рекомендацій щодо створення молекулярного перемикача.

### 2. ОБ'ЄКТ І МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ

Для проведення досліджень вибрано клас молекул пероксиду з різними замісниками  $R_1$  і  $R_2$ , природа яких варіювалася. Найпростішою молекулою із вказаного класу є перекис водню  $H_2O_2$ . Як замісники використовувалися молекулярні фрагменти чи окремі атоми, перелік яких наведено в табл. 1.

Геометрична структура молекули пероксиду зумовлена структурою молекулярних орбіталей молекули  $O_2$ . Атом кисню має електронну структуру  $(2s)^2(2p_z)^2(2p_x)^1(2p_y)^1$ . Отже, основним станом атома кисню є триплетний стан. Утворення молекули  $O_2$  зумовлює електронну структуру:  $(\sigma_s)^2(\sigma_s^*)^2(\sigma_{pz})^2(\pi_{px})^2(\pi_{py})^2(\pi_{px}^*)^1(\pi_{py}^*)^1$ . Оскільки енергія електронів, локалізованих на  $\pi_{px}^*$  і  $\pi_{py}^*$  молекулярних орбіталах, однакова, то енергетично вигідним є стан, при якому електрони на цих орбіталах розпаровані. Тому основним станом молекули є триплетний стан.

Приєднання замісників до молекули  $O_2$  приводить до локалізації зв'язків. Тому один замісник створює зв'язок з  $p_x^*$  - орбітальною одного атома, а другий зв'язок – з  $p_y^*$  - орбітальною другого атома кисню. Таким чином, слід очікувати, що двогранний кут в молекулі пероксиду буде рівним  $90^\circ$ . Таким же повинен бути кут R-O-O.

Молекула пероксиду була візуалізована за допомогою комплексного програмного продукту для молекулярного моделювання HyperChem 8.0. Він включає в себе програми, що реалізують методи молекулярної механіки, квантової хімії та молекуляр-

ної динаміки. У даному продукті реалізовані ряд напівемпіричних методів, зокрема, методи MNDO, MNDO/d, AM1, PM3 тощо. Даний пакет призначений в першу чергу для вирішення обчислювальних задач комп'ютерної хімії та нанофізики. Крім того, для підвищення точності розрахунків використовувався метод DFT. Проте, виявилось, що використання програмного пакету HyperChem 8.0 дозволяє значно швидше отримати результати, які практично не поступаються перед результатами, отриманими з допомогою методу DFT. Тому метод DFT використовувався лише для контролю за якістю отриманих з допомогою методу AM1 результатів.

### 3. РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ

Варто вказати, що наведені в літературі експериментальні дані щодо перекису водню стосуються в основному його водних розчинів. При цьому специфічна взаємодія між молекулами  $H_2O_2$  і молекулами розчинника суттєво впливає на геометричну структуру молекул пероксиду. Крім того, важливу роль в поведінці водних розчинів перекису водню грають неконтрольовані домішки, які виконують роль катализаторів розпаду  $H_2O_2$ . У зв'язку з цим, незважаючи на важливість молекул перекису водню і широке використання його в різних технологіях [8], ця молекула до цього часу залишається недостатньо вивченою. Зокрема, не вивчена її енергетична структура, конформні перетворення, непереконливо пояснена причина дисоціації молекули тощо.

Аналіз результатів розрахунку, представлених в табл. 1, показує, що в багатьох випадках для вільних молекул величина двогранного кута наближається до  $90^\circ$ . У випадку  $H_2O_2$  величина обох відзначених кутів значно відрізняється від  $90^\circ$  внаслідок кулонівського відштовхування між замісниками ( $128^\circ$  для двогранного кута і  $106^\circ$  для кута HOO). На атомах водню локалізований заряд  $+0,226e$ . Дипольний момент направлений вздовж перпендикуляру до O-O- зв'язку від його середини по бісектрисі між напрямками H-O- зв'язків, перенесених на середину O-O- зв'язку.

Зі зменшенням полярності R-O- зв'язку величина двогранного кута наближається до  $90^\circ$ . Полярність R-O- зв'язків впливає на величину дипольного моменту молекули  $R_1OOR_2$ . Наприклад, у випадку Cl-O-O-Cl (молекула № 2) на атомах хлору локалізований заряд  $-0,037e$ , внаслідок чого величина дипольного моменту суттєво зменшилася, а його напрям помінявся на протилежний. Проте, в цьому випадку у формуванні структури молекули дають вклад р- атомні орбіталі хлору, внаслідок чого кут Cl-O-O збільшений до  $115,57^\circ$ . Подібні результати отримані при заміні атома хлору на нітро-групу (молекула № 4).

При заміні атома хлору на Br (молекула № 8) внаслідок зменшення електронегативності на замісник локалізований заряд  $+0,103e$  і дипольний момент направлений так, як і у випадку перекису водню. Кут Br-O-O в цьому випадку складає  $117,58^\circ$ , тобто, близький до кута Cl-O-O. Аналогічний результат отримано для молекули № 3, де замісником виступає аміногрупа.

Заміна атома бром на атом йоду (молекула № 9) практично не змінює геометрії молекули, хоч заряд на атомі йоду збільшився до  $+0,216e$ . Причина полягає в тому, що і в цьому випадку у формуванні структури молекули основну участь беруть р- атомні орбіталі йоду.

#### 3.1 Симетричні молекули

Всього досліджено 12 типів симетричних молекул. При цьому напрями дипольних моментів у всіх випадках підлягають вище відміченому правилу. Проте, для частини молекул дипольний момент направлений так, як і у випадку перекису водню (№№ 1, 3, 6, 8, 9, 11, 12), а для решти молекул маємо протилежний напрям.

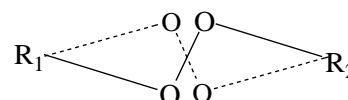
Зрозуміло, що використати симетричну молекулу, як елемент пам'яті в інтегральній схемі, можна при достатній величині дипольного моменту. Крім того, важливим параметром виступає висота бар'єру при переході від однієї конфігурації молекули до іншої: при малій величині бар'єру такий елемент не зможе забезпечити довговічну пам'ять, а при великій – для управління елементом пам'яті потребується досить велике електричне поле, яке не зможе витримати електронна система. Логічно припустити, що молекули № 2 і № 10, де замісниками виступають атоми хлору та фтору, матимуть перспективу використання в інтегральних схемах лише для забезпечення оперативної пам'яті.

Як впливає з табл. 1, понижена величина двогранного кута майже у всіх випадках спостерігається при  $\varphi = 180^\circ$ . Це зумовлено тим, що при  $\varphi = 0$  проявляється відштовхування між замісниками, яке підвищує висоту бар'єра.

Вмикання постійного електричного поля, направлено вздовж O-O- зв'язку, приводить до того, що форма двоякого потенціалу стає несиметричною. Це, в свою чергу, зумовить перехід між двома конфігураціями молекули пероксиду. Вмикання поля іншої полярності зумовить зворотний перехід між конфігураціями молекули.

Якщо перехід між конфігураціями молекули відбувається при величині двогранного кута, рівній  $180^\circ$ , то можлива зміна напрямку дипольного моменту молекули на протилежний. Проте, такі переходи не впливають на просторове впорядкування дипольних моментів молекул пероксиду.

Якщо ж такий перехід відбувається при  $\varphi = 0$ , тоді напрям дипольного моменту не зміниться, а лише зміниться знак оптичної активності молекули, тобто, відбувається заміна правого ротамера на лівий і навпаки. Оскільки замісники в молекулі пероксиду непорушно закріплені, то внаслідок такої зміни відбудеться лише зміна орієнтації зв'язку O-O, як показано на схемі:



Таблиця 1 – Параметри заміщених молекул пероксиду в газовій фазі

№ молекули	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	Двогранний кут, град	Дипольний момент, D (напряг)	Висота бар'єру, eВ (двогранний кут φ, град)
Симетричні молекули					
1	H	H	128,03	1.37 (↑)	0,01 (180)
2	Cl	Cl	87,98	0.03 (↓)	0,94 (180)
3	H <sub>2</sub> N	NH <sub>2</sub>	87,96	0.27 (↑)	0,44 (180)
4	O <sub>2</sub> N	NO <sub>2</sub>	88,80	0.89 (↓)	0,50 (180)
5	NC	CN	93,10	0.94 (↓)	0,19 (180)
6	H <sub>2</sub> N-Ph	Ph-NH <sub>2</sub>	97,33	3.18 (↑)	0,14 (180)
7	O <sub>2</sub> N-Ph	Ph-NO <sub>2</sub>	105,38	3.64 (↓)	0,12 (180)
8	Br	Br	86,58	0.88 (↑)	0,62 (180)
9	I	I	90,47	1.42 (↑)	0,27 (180)
10	F	F	88,61	0.15 (↓)	0,82 (0; 180)
11	F <sub>3</sub> CO	OCF <sub>3</sub>	93,35	0.50 (↑)	0,47 (180)
12	F <sub>3</sub> C	CF <sub>3</sub>	118,55	0.43 (↑)	0,08 (180)
Несиметричні молекули					
13	O <sub>2</sub> N	NH <sub>2</sub>	86,98	3.60 (→)	0,52 (180)
14	Cl	NH <sub>2</sub>	83,15	2.67 (→)	0,80 (0; 180)
15	Cl	NO <sub>2</sub>	90,38	0.97(→)	0,71 (180)
16	Cl	CN	88,72	0.99 (←)	0,52 (180)
17	NC	NH <sub>2</sub>	83,11	3.56 (→)	0,75 (180)
18	NC-Ph	NH <sub>2</sub>	86,50	4.03 (→)	0,12 (180)
19	F	NH-PhNH <sub>2</sub>	97,14	3.50 (→)	0,43 (180)
20	Cl	NH-PhNH <sub>2</sub>	84,73	4.04 (→)	0,82 (0; 180)
21	Br	NH-PhNH <sub>2</sub>	81,86	3.67 (→)	0,50 (0)
22	I	NH-PhNH <sub>2</sub>	81,13	3.35 (→)	0,16 (10)
23	NC	NH-PhNH <sub>2</sub>	85,03	4.74 (→)	0,38 (0; 180)
24	O <sub>2</sub> N	NH-PhNH <sub>2</sub>	86,15	4.45 (→)	0,43 (180)
25	F	NO <sub>2</sub>	91,08	0.85 (→)	0,64 (180)
26	F	OCF <sub>3</sub>	94,81	0.32 (LOO)	0,44 (0)
27	F	NH-PhNO <sub>2</sub>	91,75	4.39 (←)	0,51 (180)
28	F	NF-PhNO <sub>2</sub>	98,62	2.39 (←)	0,52 (180)
29	F	NCl-PhNO <sub>2</sub>	94,72	2.77 (←)	0,59 (180)
30	F	NBr-PhNO <sub>2</sub>	96,16	3.79 (←)	0,54 (180)
31	F	NI-PhNO <sub>2</sub>	96,38	4.53 (←)	0,48 (180)
32	F	N(NO <sub>2</sub> )-PhNO <sub>2</sub>	89,27	1.89 (←)	0,60 (180)
33	F	N(OCH <sub>3</sub> )-PhNO <sub>2</sub>	92,95	4.74 (←)	0,59 (180)

Для зміни регульованого напрямку дипольного моменту закріпленої молекули необхідно перш за все створити стеричні утруднення для обертання молекули навколо осі R-R. Для цього запропоновано створити спеціальні комірки для молекул пероксиду, як показано на рис. 1.

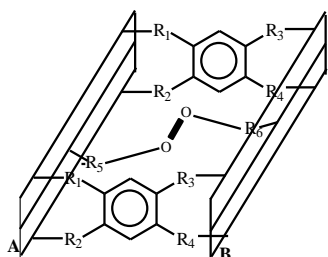
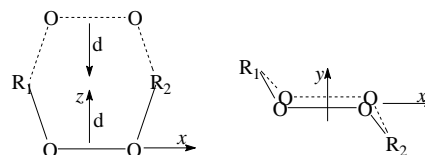


Рис. 1 – Елемент пам'яті на молекулі пероксиду

Стінки з обох боків побудовані з плоских молекул, відстань між якими повинна виключити можливість обертання молекули пероксиду. В такому разі дипольний момент пероксиду буде мати вертикальний

напряг. Під дією неоднорідного зовнішнього електричного поля, направлено вздовж дипольного моменту пероксиду, можна всі молекули пероксиду строго зорієнтувати так, щоб їхні дипольні моменти були направлені в один бік. Для перемикавання комірки пам'яті необхідно прикласти неоднорідне електричне поле протилежного напрямку. При цьому відбудеться переорієнтація молекули пероксиду, як показано на схемі:



Таким чином, в той час як однорідне електричне поле буде перемикає молекули неконтрольованим чином (якщо їхні дипольні моменти не будуть зорієнтовані в просторі), неоднорідне електричне поле зможе впорядкувати всі молекули і забезпечити необхідні і достатні умови для функціонування ко-

мірки пам'яті.

Неоднорідне електричне поле створюється зарядженим вістря (голкою). На молекулу подається короткий імпульс, тривалість якого визначається частотою коливань величини двогранного кута (табл. 2). Після переорієнтації молекули те ж вістря буде датчиком напрямку дипольного моменту молекули. Для переорієнтації молекули в початковий стан необхідно подати на вістря електричне поле іншої полярності. Час зчитування напрямку дипольного моменту молекули пероксиду повинен бути більшим тривалості управляючого імпульсу. Конкретна схема реалізації процесу запису-зчитування-стирання визначить частоту використання одного і того ж елемента пам'яті.

### 3.2 Несиметричні молекули

У випадку несиметричних молекул напрям дипольного моменту суттєво змінюється. Наприклад, у випадку молекули № 13 він має напрям від азоту нітро-групи до середини зв'язку між атомом кисню та аміногрупою.

Аналогічні результати отримані для всіх несиметричних молекул. У всіх випадках напрям дипольного моменту молекули створює невеликий кут з напрямком О-О-зв'язку. Крім того, коли замісник достатньо габаритний (наприклад, молекули 20-24 і 27-33) напрям дипольного моменту задає саме габаритний замісник, що виключає можливість переведення одного оптичного ізомера в інший. Більше того, оптична активність ізомерів таких молекул буде незначною. Тому використання такого дипольного моменту в інтегральних схемах потрібно вважати неможливим.

Проте, деякі несиметричні молекули пероксидів (зокрема, молекули 13-18, 25, 26) дозволяють в електричному полі змінюватись від одного оптичного

ізомера до іншого, що створює перспективи для відповідного використання. Малі габарити замісників дозволяють в зовнішньому електричному полі здійснюватись переміщенню зарядів через О-О-групу, змінюючи напрям дипольного моменту. Останнє, в свою чергу приведе до появи несиметричності потенціальної поверхні при обертанні замісників навколо осі О-О (рис. 2). Як наслідок, при певній величині напруженості електричного поля можливе перемикання між двома оптичними ізомерами молекули. Звертає на себе увагу той факт, що в цьому випадку перемикання молекули відбувається при куті  $\varphi = 0^\circ$ . Отже, напрям дипольного моменту не змінюється, а лише відбувається заміна одного ізомера на інший.

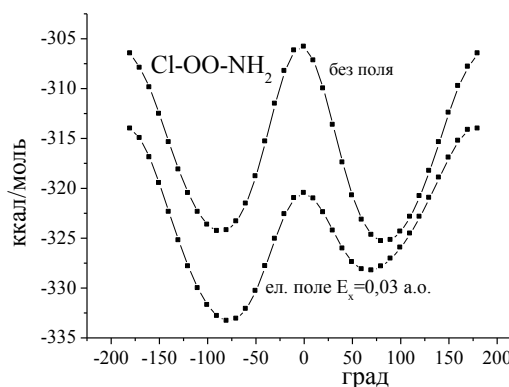


Рис. 2 – Залежність енергії електронної системи молекули Cl-OO-NH<sub>2</sub> від величини двогранного кута: без зовнішнього електричного поля і в присутності електричного поля  $E = 0,03$  атомних одиниць, направлено вздовж осі О-О

Можна помістити твердий чи рідкий полімерний розчин таких оптично активних молекул між двома прозорими електродами і за допомогою коротких імпульсів електричного поля перемикати напрям оптичного обертання поляризованого світла.

Таблиця 2 – Частота коливань зі зміною двогранного (торсійного) кута  $\varphi$ , а також енергетичні характеристики симетричних молекул пероксиду в газовій фазі

№ молекули	Частота коливань, см <sup>-1</sup>	Частота коливань, ГГц	Енергія зв'язку, еВ	Енергія зв'язку в катіоні, еВ	Енергія іонізації, еВ
1	183	5,5	- 11,22	- 0,13	11,09
2	132,3	4,0	- 6,23	5,58	11,81
3	201,4	6,0	- 22,02	-15,98	6,04
4	133,3	4,0	- 24,15	- 11,38	12,77
5	67,6	2,0	- 25,55	- 12,26	13,29
6	66,5	2,0	- 128,84	- 121,35	7,49
7	86,6	2,6	- 129,68	- 119,47	10,21
8	77,5	2,3	- 5,90	5,06	10,96
9	49,1	1,5	- 4,74	4,84	9,58
10	197,9	5,9	- 5,89	7,37	13,26
11	38,4	1,2	- 44,04	- 33,79	10,25
12	49,8	1,5	- 40,13	- 29,26	10,86

Передбачається, що час перемикання буде близьким до періоду відповідного коливання. Наприклад, у випадку молекули № 13 частота коливань складає  $6 \cdot 10^{10}$  Гц. Отже, перемикання можливе при тривалості електричного імпульсу порядку 20 пс.

Відзначимо, що елементом пам'яті не може слу-

жити наночастинка з молекул пероксиду, оскільки така частинка не може бути створеною внаслідок диполь-дипольної взаємодії між окремими молекулами. Крім того, зустріч двох вільних молекул пероксиду (зокрема, перекису водню) спричинює протікання хімічних реакцій з утворенням молекули во-

ди, молекулярного кисню, атома водню і радикала  $\text{OH}^\bullet$ . Окрема ж молекула пероксиду досить стабільна: енергія  $\text{OH}$ -зв'язку становить приблизно 4 еВ, а  $\text{O-O}$ -зв'язку – 1,66 еВ.

#### 4. ВИСНОВКИ

На підставі проведених досліджень можна зробити наступні висновки:

1. Дипольний момент симетричних заміщених молекул пероксиду направлений перпендикулярно до зв'язку  $\text{O-O}$  від його середини вздовж бісектриси між напрямками  $\text{R-O}$ - зв'язків, перенесених на середину  $\text{O-O}$ - зв'язку.

2. При зміні величини двогранного кута від 0 до  $180^\circ$  реєструється зміна енергії електронної системи молекули, яка характеризується двоямним потенціалом.

3. У випадку симетричних молекул пероксидів мінімальний потенціальний бар'єр, через який можливе перетворення молекули між двома її конформаціями, спостерігається при куті  $\varphi = 180^\circ$ .

4. Внесення молекули в однорідне зовнішнє електричне поле, направлене вздовж осі  $\text{O-O}$ , двоямним

потенціал стає несиметричним, що викличе перетворення молекули пероксиду з однієї форми в іншу. Заміна напрямку зовнішнього електричного поля поверне молекулу в початковий стан.

5. У випадку симетричних молекул пероксиду перетворення молекули з одного конфірмаційного стану в інший може супроводжуватись зміною напрямку дипольного моменту. Така зміна буде обов'язковою і регульованою лише в неоднорідному електричному полі, направленому перпендикулярно до осі  $\text{O-O}$ .

6. У випадку несиметричних молекул з малогабаритними замісниками в микання зовнішнього однорідного електричного поля, направленого вздовж осі  $\text{O-O}$  молекули, викликає пониження бар'єру при  $\varphi = 0$ . Це дозволяє перевести молекули з одного оптично активного стану в інший. Зміна напрямку дипольного моменту молекули при цьому не відбувається.

7. У випадку несиметричних молекул з крупногабаритними замісниками дипольний момент молекули формується замісником. Тому така молекула не реагує на вмикання зовнішнього електричного поля.

### Memory Element Based on Peroxide Molecule

P.O. Kondratenko<sup>1</sup>, Yu.M. Lopatkin<sup>2</sup>, A.G. Malashenko<sup>2</sup>, T.M. Sakun<sup>1</sup>, A.Ye. Marinchenko<sup>1</sup>

<sup>1</sup> National Aviation University, 1, Komarova Ave, 03680 Kyiv, Ukraine

<sup>2</sup> Sumy State University, 2, Rimsky-Korsakov Str., 40007 Sumy, Ukraine

The paper is devoted to the study of the possibility of using individual peroxide molecules of the general formula  $\text{R}_1\text{-O-O-R}_2$  as elements of integrated circuits. As a result of the studies, it was shown that these molecules are characterized by the double pitted potential surface when the value of the dihedral angle  $\text{R}_1\text{-O-O-R}_2$  is changed. In this case, the dipole moment of the symmetric substituted peroxide molecules is oriented perpendicularly to the bond  $\text{O-O}$  from its midpoint along the bisector between the directions of  $\text{R-O}$ -bonds. When applying an external homogeneous electric field directed along the  $\text{O-O}$ -bond, the double pitted potential surface becomes asymmetric, which determines the transition from one conformation of the molecule to another, changing the direction of the dipole moment to the opposite one. However, such field is not capable to order the dipole moments of different molecules. The latter can be achieved by applying an inhomogeneous electric field directed along the dipole moment of the molecule. On the other hand, asymmetric molecules with simple substituents under the action of an external electric field can only change the direction of optical activity. The use of large molecular fragments as substituents results in the loss of the sensitivity of molecules to an external electric field.

**Keywords:** Molecular switch, Nanophysics, Potential surface, Potential barrier, Influence of electric field, Dipole moment.

### Элемент памяти на основе молекулы пероксида

П.А. Кондратенко<sup>1</sup>, Ю.М. Лопаткин<sup>2</sup>, А.Г. Малашенко<sup>2</sup>, Т.Н.Сакун<sup>1</sup>,А.Е. Маринченко<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Национальный авиационный университет, пр. Комарова, 1, 03680 Киев, Украина

<sup>2</sup> Сумский государственный университет, ул. Римского-Корсакова, 2, 40007 Сумы, Украина

Работа посвящена изучению возможности использования отдельных молекул пероксида общей формулы  $\text{R}_1\text{-O-O-R}_2$  как элементов интегральных схем. В результате проведенных исследований было показано, что эти молекулы характеризуются двоямной потенциальной поверхностью при изменении величины двугранного угла  $\text{R}_1\text{-O-O-R}_2$ . При этом дипольный момент симметричных замещенных молекул пероксида направлен перпендикулярно связи  $\text{O-O}$  от его середины вдоль биссектрисы между направлениями  $\text{R-O}$ -связей. При приложении внешнего однородного электрического поля, направленного вдоль  $\text{O-O}$ -связи, двоямная потенциальная поверхность становится несимметричной, что обуславливает переход от одной конформации молекулы к другой, изменяя направление дипольного

момента на противоположный. Однако, такое поле не способно упорядочивать дипольные моменты различных молекул. Последнее удается достичь при приложении неоднородного электрического поля, направленного вдоль дипольного момента молекулы. С другой стороны, несимметричные молекулы с простыми заместителями под действием внешнего электрического поля могут изменять только направление оптической активности. Использование больших молекулярных фрагментов как заместителей приводит к потере чувствительности молекул к внешнему электрическому полю.

**Ключевые слова:** Молекулярный переключатель, Нанопфизика, Потенциальная поверхность, Потенциальный барьер, Влияние электрического поля, Дипольный момент.

## СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Н.Г. Рамбиди, А.В. Берёзкин, *Физические и химические основы нанотехнологий* (Москва: Физматлит: 2009).
2. Н.Г. Рамбиди, *Нанотехнологии и молекулярные компьютеры* (Москва: Физматлит: 2007).
3. E.G. Petrov, V.O. Leonov, V. May, P. Hanggi, *Chem. Phys.* **407**, 53 (2012).
4. E.G. Petrov, *Ukr. J. Phys.* **56**, 721 (2011).
5. S.J. van der Molen, J. Liao, T. Kudernac, J.S. Agustsson, L. Bernard, M. Calame, B.J. van Wees, B.L. Feringa, C. Schönenberger, *Nano. Lett.* **9**, 76 (2009).
6. А.Г. Малашенко, Т.Н. Сакун, П.А. Кондратенко, Ю.М. Лопаткин, *Ж. нано-электрон. физ.* **5**, 04069 (2013).
7. P.O. Kondratenko, Yu.M. Lopatkin, A.G. Malashenko, T.N. Sakun, *Phys. Chem. Indian J.* **9**, 160 (2014).
8. В.Л. Антоновский, С.Л. Хурсан, *Физическая химия органических пероксидов* (М.: ИКЦ Академкнига: 2003).