

Устройства функциональной электроники

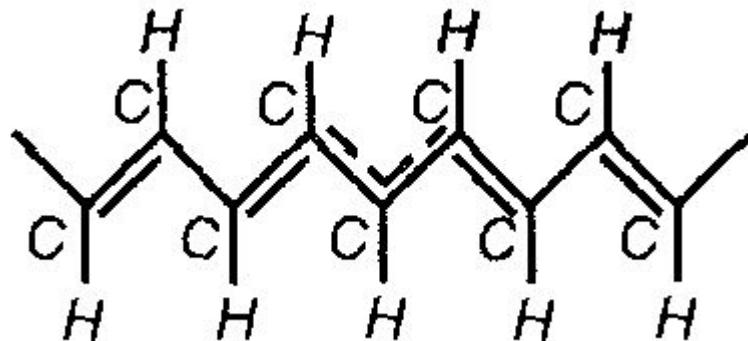
Функциональная молекулярная электроника

Функциональная молекулярная электроника представляет собой направление в функциональной электронике, в котором изучаются **процессы переноса и хранения информационного сигнала в молекулярных системах**, а также разработка **молекулярно-инженерных технологий** для создания приборов и устройств обработки и хранения информации.

Идеи молекулярной электроники несколько **отличаются от идей микроэлектроники**. В процессе создания и микроминиатюризации приборов микроэлектроники создаются технологические процессы, связанные с удалением лишнего материала, изменением проводящих свойств материала с целью создания физических барьеров и переходов.

В **молекулярной электронике** развиваются методы конструирования и изготовления органических молекул с заданными свойствами, методы агрегации молекул нескольких типов.

Первые методы связаны с созданием материалов с заданными электрическими свойствами путем подбора размеров молекул, их формы, взаимного пространственного их расположения, параметров различных функциональных групп молекул. Этот метод получил название **молекулярная инженерия** и с его помощью разработана концепция создания молекулярного электронного прибора.

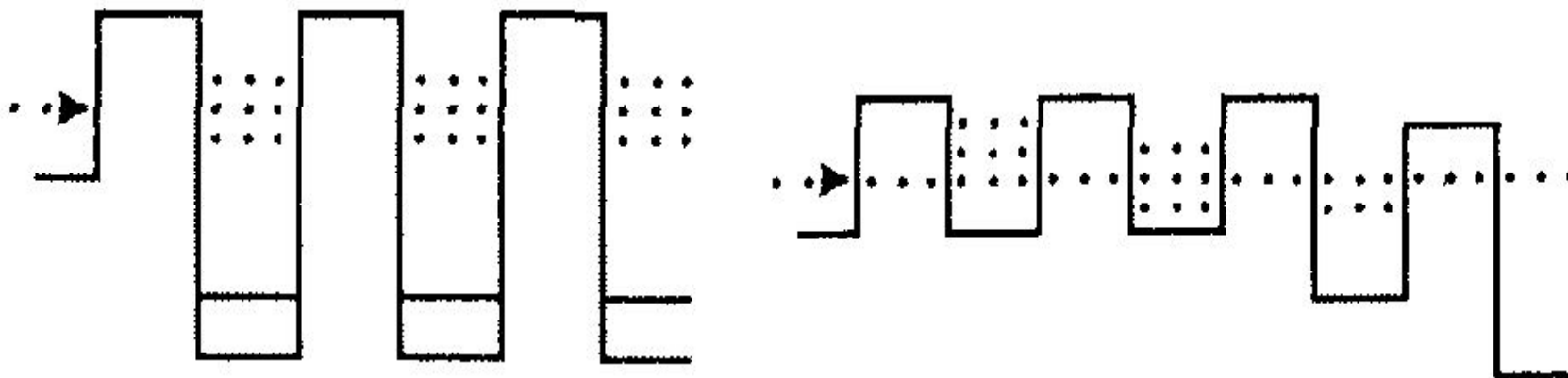


Функциональная молекулярная электроника

Молекулярное устройство приобрело статус **электронного устройства** после того, как были изготовлены переключатели и инверторы на молекулярном уровне.

Проводниками, линиями межсоединений в таких структурах служат одномерные полимеры типа трансполиацетилена $(CH)_x$ или нитрида серы $(SN)_x$. Электрически механизм переключения на молекулярном уровне эквивалентен изменению валентности молекул. Валентность же связана с туннелированием электронов через неширокие периодические решетки, образованные молекулами.

Электрон способен преодолеть периодическую молекулярную решетку только при определенных значениях энергии. Электроны свободно проходят через систему потенциальных барьеров при условии равенства или превышения энергии псевдостационарного уровня.



Функциональная молекулярная электроника

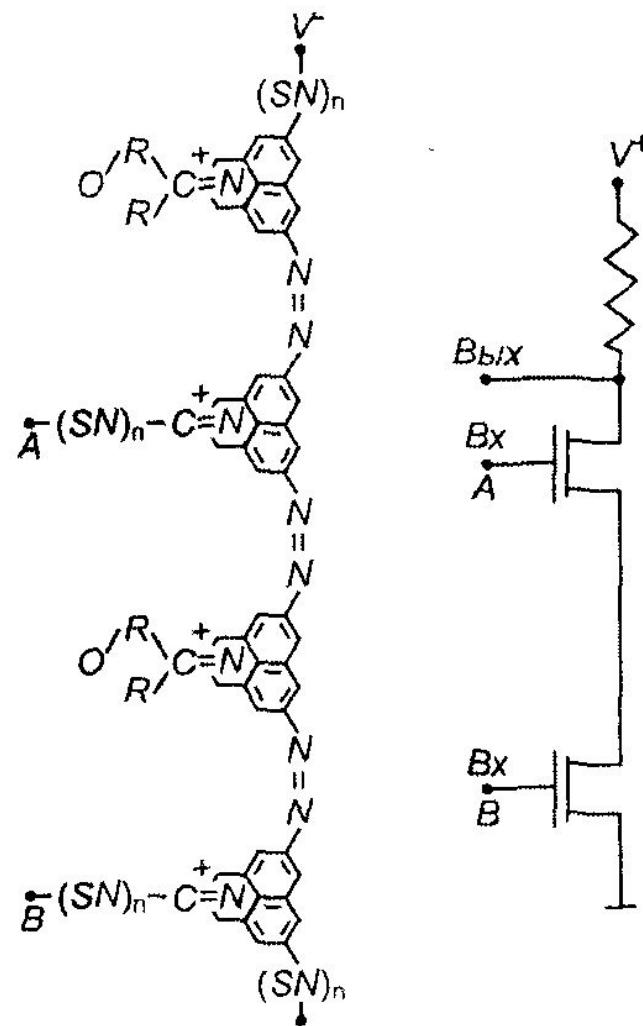
Управление в подобных структурах осуществляется регулированием высоты барьера или глубины ямы внешними факторами.

Среди таких механизмов – 1) перемещение положительного или отрицательного заряда внутри молекулярной цепочки, 2) переключение потока туннелирующих электронов путем смещения высоты псевдоэнергетических барьеров.

Этот метод развивает схемотехнические принципы обработки информации и ее хранения.

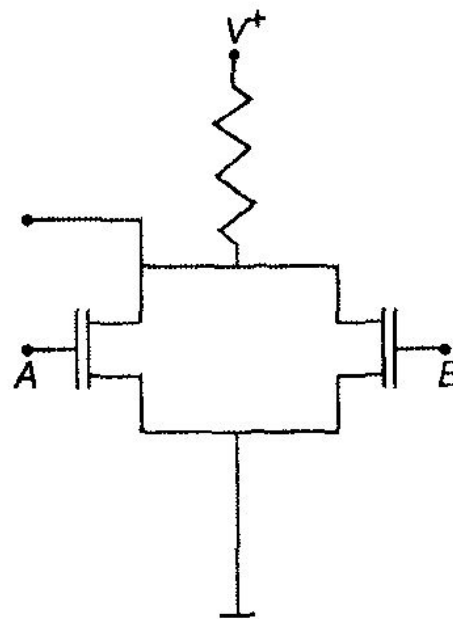
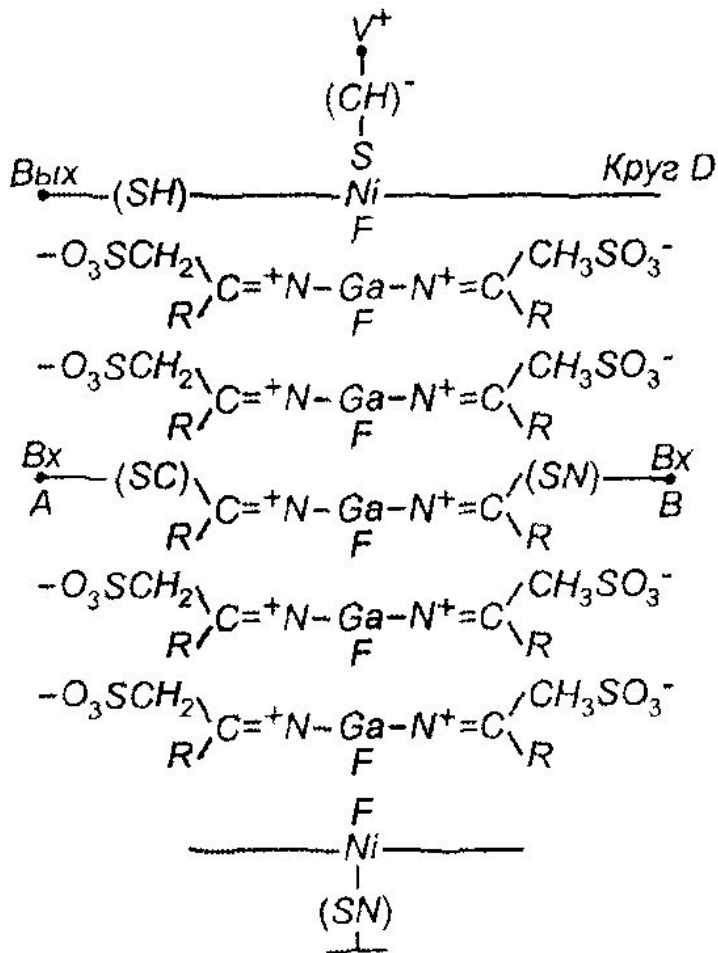
Молекулярный аналог элементарной логической ячейки «И – НЕ» строится на базе тетрамерной производной с диазосвязями.

Периодический потенциал формируется четвертичными атомами азота, входящими в структуру. Две из четырех контрольных групп могут управляться потоками заряда через цепочки $(CH)_x$ путем нейтрализации положительного заряда.



Функциональная молекулярная электроника

Молекулярная ячейка типа «ИЛИ – НЕ» представляет собой набор колец фталоцианида галлия, связанных фтором. Соединения типа $Ni - S$ обеспечивают заземление и связь с отрицательным потенциалом, а также с выходным выводом $(SN)_n$.



Функциональная молекулярная электроника

Эти базовые элементы могут стать составными частями **биологических компьютерных систем**. Размеры структур логических ячеек могут составлять менее одной сотой размера полупроводниковой логической ячейки. Ожидаемая плотность размещения составит 10^{18} вентиляй/см³.

При всей привлекательности такой идеи молекулярных схем (даже с точки зрения использования при создании компьютеров) в ней содержится врожденный порок схемотехники. Речь идет о тех же схемотехнических решениях, тех же проводах, хотя это уже не пленочные токоведущие дорожки, а молекулярные цепочки. Все это не исключает возможность возникновения традиционных для схемотехнических решений недостатков, а также новых, специфика которых состоит в налаживании надежных контактов между отдельными соединениями.

Методы агрегации определенного числа молекул нескольких типов или межмолекулярной самосборки позволяют получать заданные размеры и форму функционального элемента за счет выбора параметров, участвующих в самосборке молекулы, создать серию функциональных элементов без разброса параметров со строгой атомной детализацией.

Для получения **сверхтонких пленок** используется *метод Ленгмюра – Блоджетт* – использование нерастворимых поверхностно-активных веществ, которые формируют из двух фрагментов: 1) **гидрофильное вещество**, имеющее сродство к воде, и хорошо в ней растворяющееся, 2) **гидрофобное вещество**, не растворимое в воде, не позволяющее молекуле поверхностно-активного вещества погрузиться в воду. Формирующиеся на поверхности воды однородные мономолекулярные пленки могут быть перенесены на твердые структуры подложки с различными типами слоев.

Функциональная молекулярная электроника

1. Динамические неоднородности

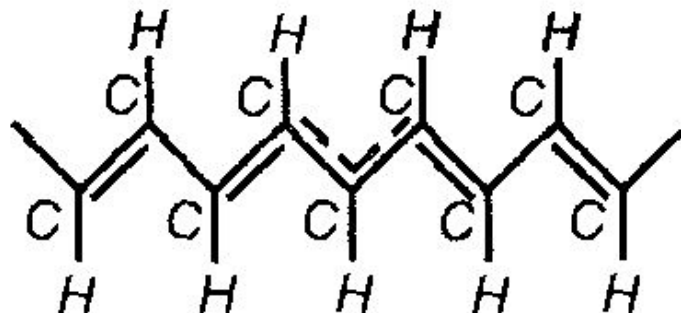
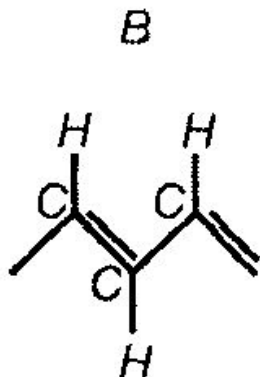
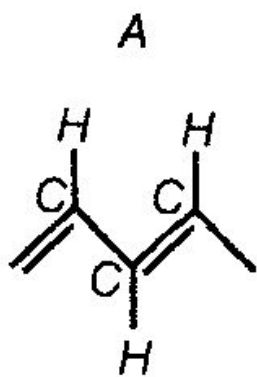
1). Передача информации в молекулярной электронике осуществляется ансамблями электронов или солитонов.

В масштабах микромира под солитоном понимают структурное возмущение, способное перемещаться в одном или двух направлениях подобно частице. Перенос солитона связан с возмущением, которое меняет положение молекулярных

π -орбиталей между атомами углерода. В центре солитона существует движущаяся *межфазная* или *междолинная* граница между эквивалентными фазами *A* и *B*. Прохождение солитона через сопряженную систему приводит к переходу между фазами *A* и *B* и к обмену одинарных и двойных связей.

Солитоны могут быть интерпретированы как топологические узлы валентной π -электронной системы.

Вследствие врожденности основного состояния электропроводящих полимеров солитоны могут свободно перемещаться вдоль цепи сопряжений подобно электронам. Скорость перемещения солитонов близка



Функциональная молекулярная электроника

1. Динамические неоднородности

2). Наряду с солитонами в молекулярной системотехнике используются **процессы переноса электронов по цепочкам различных циклических молекул**, даже разделенных зазором до 1 нм.

Электроны туннелируют по молекулам, переходя в соседние молекулы за время $\sim 10^{-12} - 10^{-10}$ с. Основным эффектом при этом является быстрое резонансное и одновременно однонаправленное туннелирование за счет того, что уровень для лишнего электрона в каждой последующей молекуле на 0,1 – 0,2 эВ ниже, чем в предыдущей. Эффект быстрого резонансного туннелирования проявлялся в континуальных молекулярных средах, у которых молекулы в цепочке подобраны так, что энергия электрона, поляризовавшего одну молекулу, равна энергии электронного уровня другой, не поляризованной молекулы. Другими словами, цепочка молекул должна строиться так, чтобы энергии уровней для лишнего электрона снижались на 0,1 – 0,2 эВ.

3). В **ленгмюровских пленках** с помощью света можно возбудить **экситоны**, представляющие собой мигрирующее электронное возбуждение, не связанное с переносом электрического заряда.

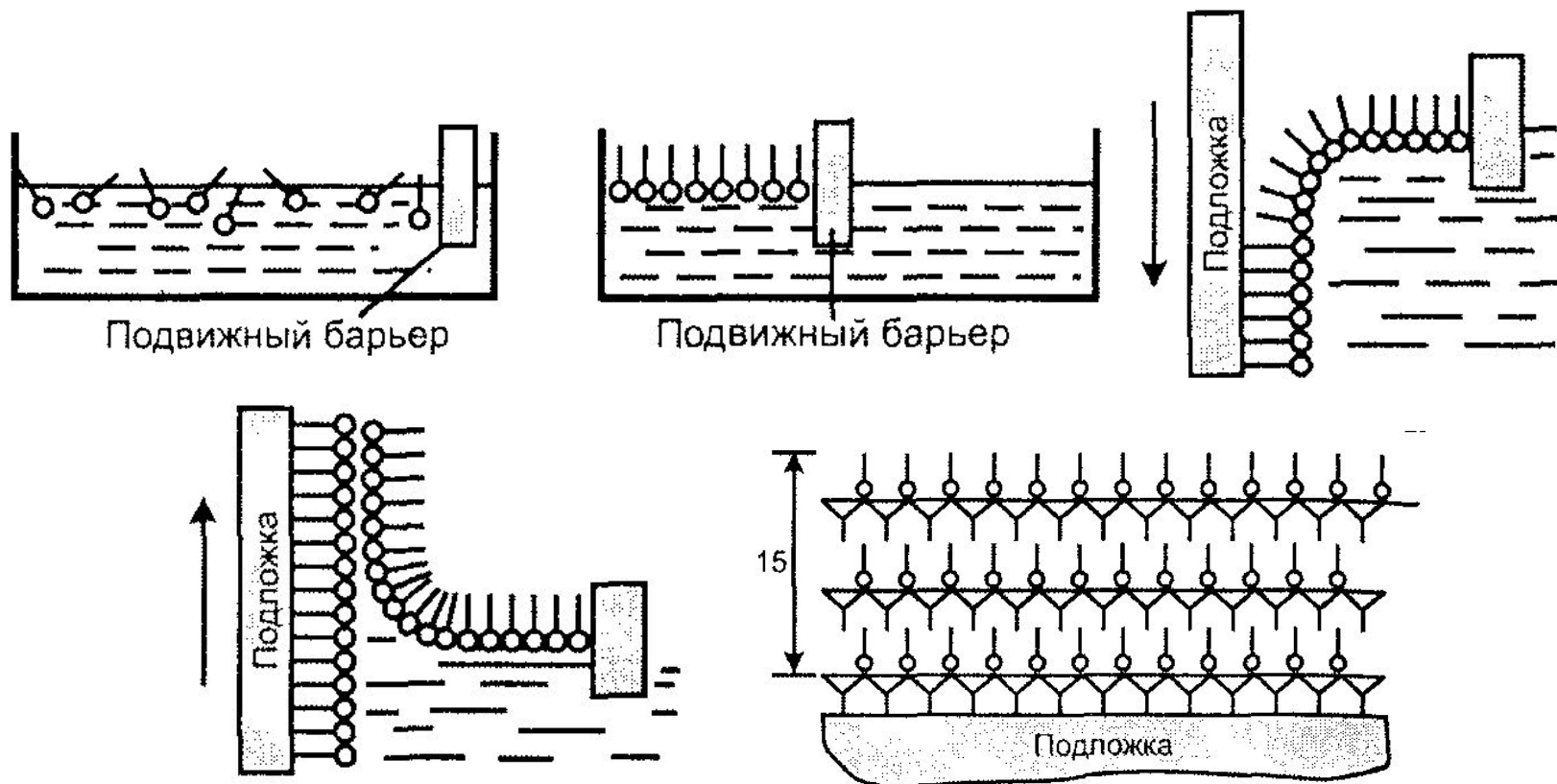
4). В качестве динамической неоднородности можно использовать **один электрон**. Это позволяет достичь энергетического предела, минимизировать энергию на одну информационную операцию. Использование только одного электрона накладывает значительные ограничения на «одноэлектронику».

Функциональная молекулярная электроника

2. Континуальные среды

Ленгмюровские пленки представляют собой многофункциональную континуальную среду.

На основе пленок Ленгмюра – Блоджетт можно создать молекулярно-гладкую континуальную среду со свойствами проводника, подзатворного диэлектрика, плазмостойкого резистора, пирозлектрика и биосенсора.

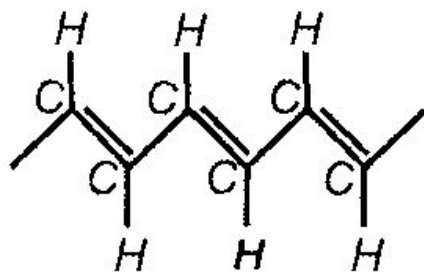


Функциональная молекулярная электроника

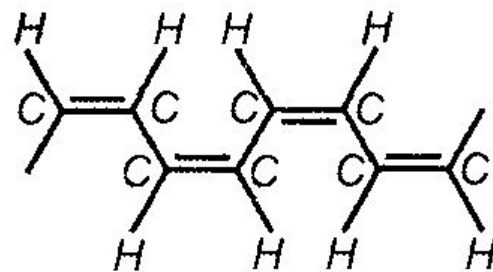
2. Континуальные среды

Перспективной средой для функциональной молекулярной электроники являются органические полимеры. Они состоят из цепочки слабосвязанных молекул с частично заполненными зонами валентных электронов.

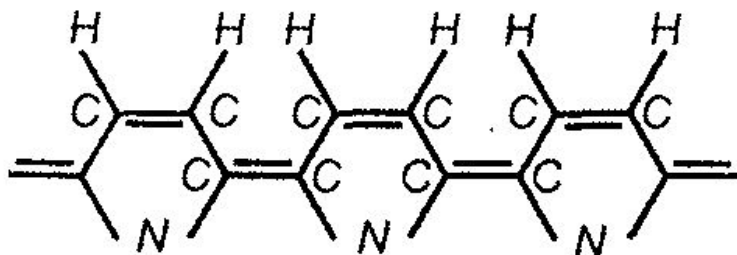
Квазиодномерный органический полимер полиацетилен может быть легирован донорами (K, Na, Li) и акцепторами (Br, AsF_5, PF_6), и имеет слабое взаимодействие электронов с решеткой.



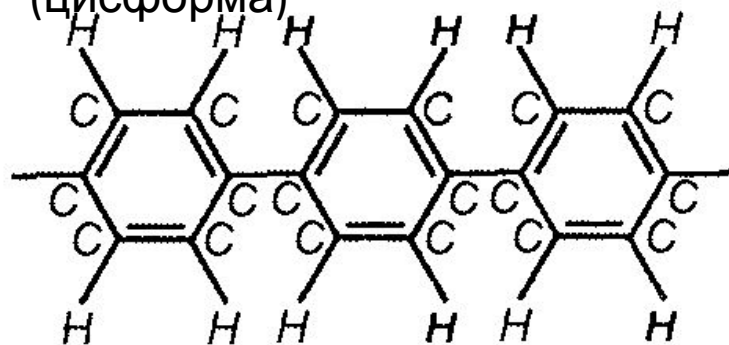
полиэтилен
(трансформа)



полиэтилен
(цисформа)



полипрол
л



полифиниле
н

Функциональная молекулярная электроника

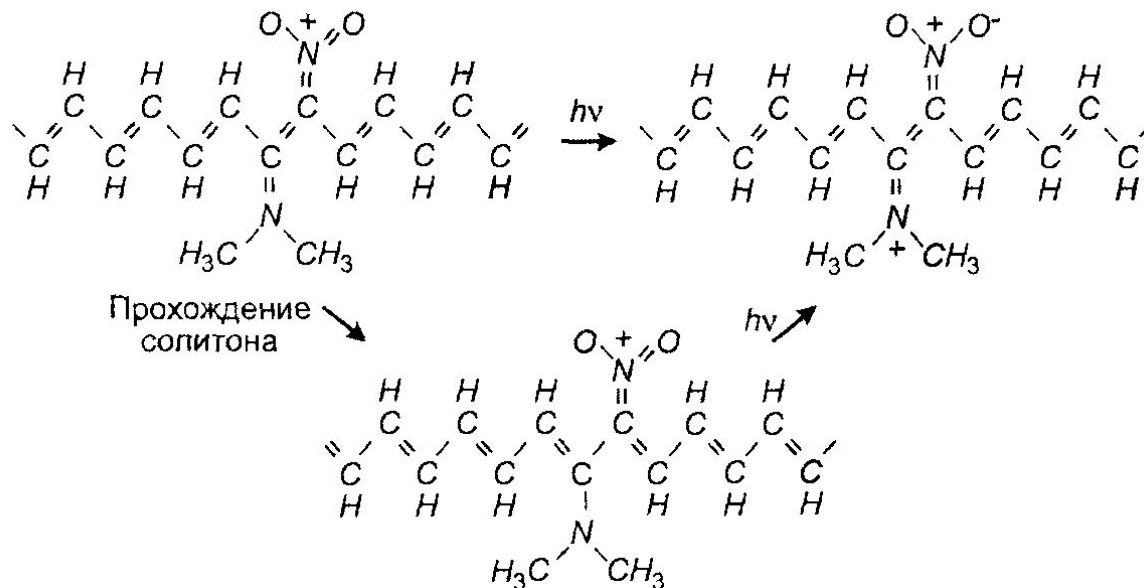
3., 4., 5. Генерация, управление и детектирование ДН

Динамическими неоднородностями типа электронов и солитонов в молекулярных структурах можно управлять.

В молекулярной системе, в которой двойная связь является частью большой полиацетиленовой цепочкой, под воздействием поляризованной фотоактивации включается процесс переноса электронов.

При прохождении солитона фотоактивационный процесс становится невозможным. Т.е. солитон включает реакцию внутреннего переноса заряда, а изменения в спектре поглощения олефина может служить детектором, регистрирующим прохождение солитона.

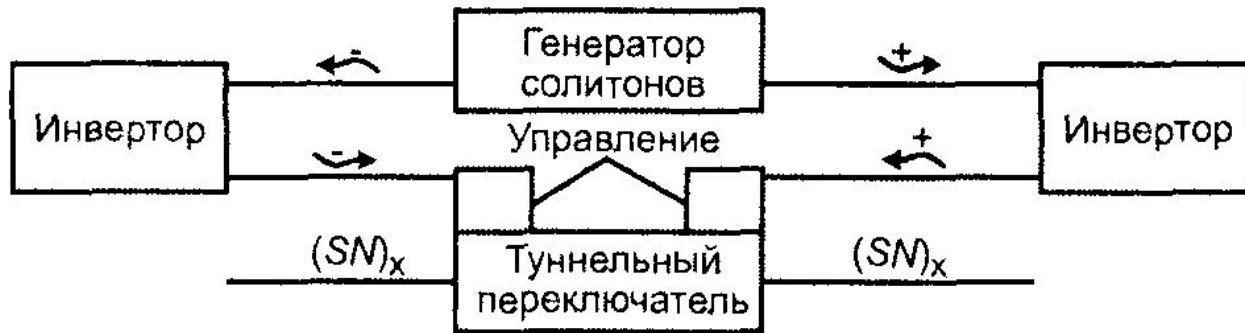
Генерация солитонов осуществляется в процессе протонного туннелирования, например, между вторичным анином и кетонной группой трансполиацетилена в присутствии



Функциональная молекулярная электроника

Молекулярные устройства

Хранение бита информации в солитонной памяти определяется наличием или отсутствием солитона, а число хранимых битов зависит от скорости распространения солитона и длины сопряженного полимера.



Сопряженный полимер связывает генератор солитонов (ГС) и электронный туннельный переключатель (ТП).

При одновременном прибытии положительного и отрицательного солитонов срабатывает туннельный переключатель.

Солитонные устройства памяти не имеют высокого быстродействия, однако, отличаются высокой плотностью хранения информации.

Оценки показывают, что если расстояние между солитонами составляет $\sim 200 \text{ \AA}$, а расстояние между центрами цепочек $\sim 50 \text{ \AA}$, то информационная емкость близка к $\sim 10^{18}$ бит/см³.

Функциональная молекулярная электроника

Молекулярные устройства

В устройствах памяти могут быть использованы и пленки Ленгмюра – Блоджетт. Каждая молекулярная система имеет свою частоту поглощения. Запись информации осуществляется избирательно в ансамбль молекул трехмерной молекулярной пленки с помощью лазерного излучения определенной частоты. Считывание информации осуществляется за счет обратных физических явлений. Использование свойств молекулярных структур позволяет создать трехмерные запоминающие устройства высокой информационной емкости.

Существуют различные идеи построения молекулярных компьютеров. Их микросборка, например, может быть осуществлена химическим осаждением из газовой фазы. Последовательность химических превращений при создании молекулярной вычислительной машины рассчитывается по заданному алгоритму.

В итоге к базовой молекуле добавляются все новые и новые звенья, формируются проводники, изоляторы, вентили, компоненты вычислительных устройств. Так, например, размер молекулярного вентиля может быть меньше одной сотой микрометра, а плотность сборки может достичь 10^{18} вентиляей/см³.

Функциональная молекулярная электроника

Молекулярные устройства

Процессор и память гипотетического молекулярного компьютера занимают объем ~ 1 см и монтируются на криостате, который предотвращает нагрев контактов и снижает химическую активность молекул. Для уменьшения количества межсоединений предусматривается использование оптических каналов для ввода-вывода информации.

Обработка информационных массивов молекулярными системами имеет ряд особенностей, среди которых важнейшими являются:

- гигантский параллелизм переработки информации;
- высокая эффективность преобразования информации;
- значительная информационная сложность исходных операций;
- способность к изменчивости и эволюции молекулярных компонентов устройств переработки информации и эволюционному обучению (самообучению) устройств;
- динамические механизмы переработки информации, основанные на сложных нелинейных процессах.