

ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР ПОГЛОЩЕНИЯ СТРУКТУРНОГО ЭЛЕМЕНТА МОЛЕКУЛЯРНОГО ПЕРЕКЛЮЧАТЕЛЯ М.РИДА И Д.ТУРА

¹Тен Г.Н., ¹Уткин И.С., ¹Саяпин К.А., ²Баранов В.И.

¹ Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, Саратов

² Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского РАН, Москва

¹Тен Г.Н.,
¹Уткин И.С.,
¹Саяпин К.А.,
²Баранов В.И.

¹Саратовский
государственный
университет им.
Н.Г. Чернышевского,
²Институт геохимии и
аналитической химии им.
В. И. Вернадского РАН

Одной из важных задач молекулярной электроники на сегодняшний день является создание таких электронных элементов, как молекулярные переключатели. Научные группы под руководством Марка Рида и Джеймса Тура создали новый тип молекулы-переключателя, открывающий, по общему мнению, новый этап практической реализации теоретических идей молекулярной электроники. На рис. 1 представлена молекулярная диаграмма бензол-1,4-дителилата, являющегося структурным элементом переключателя М.Рида и Д.Тура. Принцип действия переключателя заключается в способности фрагментов NO₂ и NH₂ захватывать электроны, если на молекулярную цепочку подаётся напряжение, и удерживать заряд в течение некоторого времени. Для переключения системы необходимо, чтобы кинетическая энергия поступающих электронов совпадала с одним из собственных уровней энергии молекулярной системы.

В данной работе был получен электронный спектр бензол-1,4-дителилата в основном (невозбуждённом) состоянии (рис. 2). Расчёт электронного спектра был выполнен методом DFT с помощью программы Gaussian-09 и набора базисных функций 6-311++g(d,p) [1].

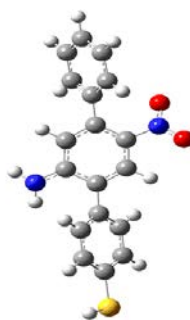


Рис. 1. Молекулярная диаграмма бензол-1,4-дителилата

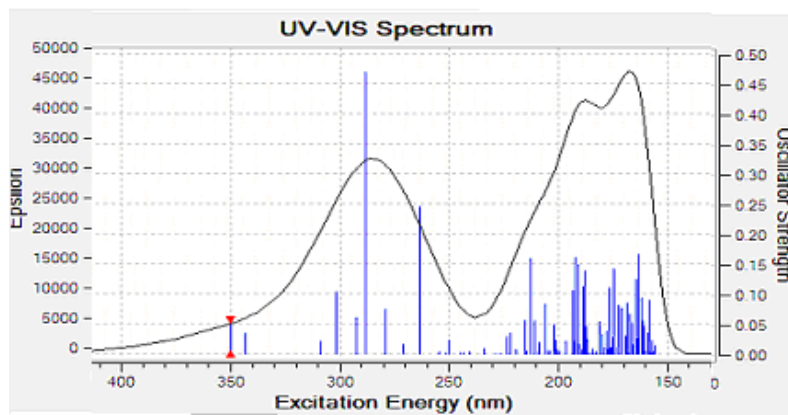


Рис. 2. Электронный спектр бензол-1,4-дителилата в основном состоянии

Спектр поглощения бензол-1,4-дителилата в основном состоянии до внешнего воздействия имеет три полосы поглощения, максимумы которых лежат в области ~ 290, 190 и 160 нм.

Литература

1. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 09. Gaussian Inc., Wallingford CT, 2009. 394 p.