

Белонович Валерия Львовна, Палий А.В.

**К проблеме рационального дизайна молекулярных квантовых клеточных автоматов: как примирить сильный нелинейный отклик с низким тепловыделением**

Молекулярные квантовые клеточные автоматы (МККА) — это концепция устройств молекулярной электроники на основе бистабильных молекулярных ячеек. Двум различным состояниям ячейки можно сопоставить логические состояния 0 и 1, то есть, одна ячейка может кодировать 1 бит информации. В роли молекулярных ячеек могут выступать соединения смешанной валентности (СВ), двоичная информация в которых кодируется различными зарядовыми конфигурациями. Передача информации от ячейки к ячейке осуществляется с помощью кулоновского взаимодействия между ними: поляризованная ячейка воздействует на соседние ячейки, приводя к их поляризации. Отметим два основных требования к молекулярным ячейкам:

1) Легкая поляризуемость ячейки, то есть, сильный отклик на приложенное электрическое поле.

2) Тепловыделение в процессе переключения между логическими состояниями должно быть минимизировано, так как из-за молекулярных размеров ячеек плотность размещения ячеек достаточно велика, и суммарное тепловыделение в устройстве может привести к выходу за рамки рабочего температурного диапазона.

В данной работе анализируются зависимость поляризационных и диссипативных свойств соединений СВ от параметров системы. Мы показали, что несмотря на то, что на первый взгляд, требования сильного отклика и низкого тепловыделения противоречат друг другу, существуют

параметрические режимы, при которых одновременно удовлетворяются оба этих требования. Найденные общие закономерности проиллюстрированы на примере серии соединений СВ, включающий окисленный норборнадиен и его полициклические производные. Результаты работы опубликованы в серии статей в журналах The Journal of Physical Chemistry A, Physical Chemistry Chemical Physics, The Journal of Chemical Physics и Magnetic Resonance in Solids.