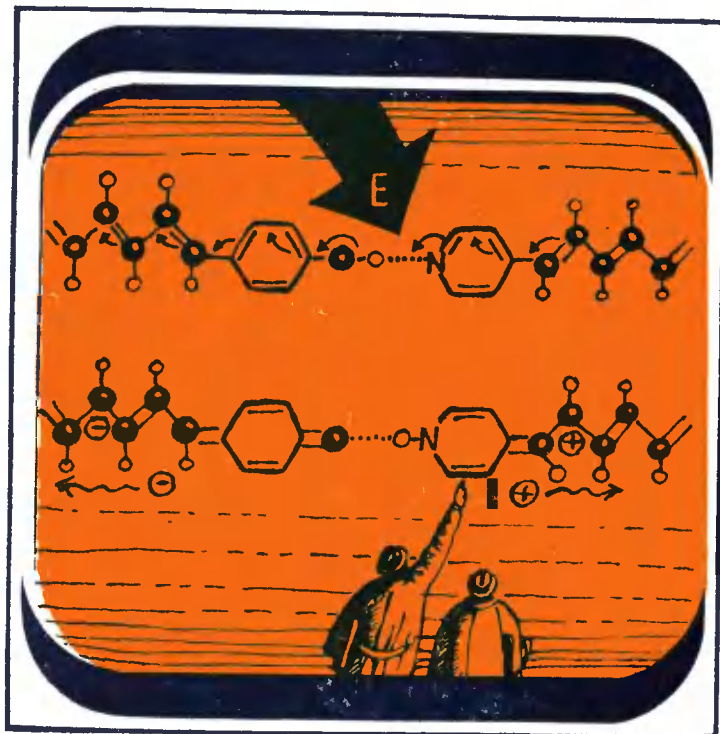


## ДОРОГОЙ ЧИТАТЕЛЬ!

Брошюры этой серии в розничную продажу не поступают, поэтому своевременно оформляйте подписку. Подписка на брошюры издательства „Знание“ ежеквартальная, принимается в любом отделении „Союзпечати“.

Напоминаем Вам, что сведения о подписке Вы можете найти в „Каталоге советских газет и журналов“ в разделе „Центральные журналы“, рубрика „Брошюры издательства „Знание““.

Цена подписки на год 1 р. 32 к.



СЕРИЯ  
**ФИЗИКА**

**ФИЗИКА**

ПОДПИСНАЯ НАУЧНО-ПОПУЛЯРНАЯ СЕРИЯ



1985/11

**Н.Г. Рамбиди  
В.М. Замалин**

**МОЛЕКУЛЯРНАЯ  
МИКРОЭЛЕКТРОНИКА:  
ИСТОКИ И НАДЕЖДЫ**



**ЗНАНИЕ**

НОВОЕ В ЖИЗНИ, НАУКЕ, ТЕХНИКЕ



НОВОЕ В ЖИЗНИ, НАУКЕ, ТЕХНИКЕ

ПОДПИСНАЯ НАУЧНО-ПОПУЛЯРНАЯ СЕРИЯ

## **ФИЗИКА**

11/1985

Издается ежемесячно с 1967 г.

Н. Г. Рамбиди,  
В. М. Замалин

**МОЛЕКУЛЯРНАЯ  
МИКРОЭЛЕКТРОНИКА:  
ИСТОКИ  
И НАДЕЖДЫ**

Издательство «Знание» Москва 1985

**ББК 22.36**

**Р 21**

**РАМБИДИ** Николай Георгиевич — доктор химических наук, профессор, лауреат Государственной премии, директор Всесоюзного научно-исследовательского Центра по изучению свойств поверхности и вакуума.

**ЗАМАЛИН** Вадим Моисеевич — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Всесоюзного научно-исследовательского Центра по изучению свойств поверхности и вакуума.

**Рамбиди Н. Г., Замалин В. М.**

**Р 21** Молекулярная микроэлектроника: истоки и надежды. — М.: Знание, 1985. — 64 с. — (Новое в жизни, науке, технике. Сер. «Физика»; № 11).

11 к.

Современные физические принципы функционирования и изготовления микроэлектронных приборов не позволяют получать элементы с размерами менее 0,1—1 мкм. В брошюре рассматривается новое перспективное направление, позволяющее перешагнуть этот предел и связанное с возможностью использования сравнительно малых молекулярных ансамблей и отдельных молекул для хранения, передачи и преобразования информации.

Брошюра предназначена для широкого круга читателей, интересующихся современными проблемами физики.

**1704060000**

**ББК 22.36  
530.3**

В последние годы в научной и научно-популярной литературе и на представительных конференциях обсуждаются новые области развития микроэлектроники, сулящие резкое повышение характеристик электронных устройств и граничащие на первый взгляд с фантастикой. Среди них — создание молекулярных электронных схем (их нередко за рубежом называют биочипы), в которых роль отдельных элементов должны играть большие органические, или биологические, молекулы. Одновременно в лабораториях различных стран мира идет активный поиск новых идей, методов исследования, технологий создания устройств, нужных для реализации этой программы.

Сразу же нужно сказать, что сегодня нет оснований считать, что даже в сравнительно отдаленном будущем молекулярные электронные изделия полностью вытеснят традиционную полупроводниковую технику. Тем не менее в некоторых важных областях развития микроэлектроники переход на молекулярную базу представляется заманчивым.

В случае успеха он должен привести к резкому повышению степени микроминиатюризации электронных устройств. А это, в свою очередь, может предоставить качественно новые возможности использования микроэлектронных схем. Например, возможность вживления непосредственно в организм человека микроминиатюрных электронных биопротезов, имитирующих отдельные функции нервной системы.

Более того, белковые молекулы и, в частности, ферменты, из которых предполагается конструировать молекулярные схемы, по своим информационно-логическим свойствам значительно сложнее и многообразнее, чем существующая полупроводниковая элементная база. Поэтому не исключена возможность, что они будут более

естественными, оптимальными «кирпичиками» для построения устройств искусственного интеллекта, осуществляющих функции распознавания образов, сложной логической обработки информации, принятия решений.

В целом можно сказать, что в современных представлениях молекулярной микроэлектроники много интересных идей и заманчивых предложений, основанных на реальных физических явлениях и фактах. Разработка их сложна, нужно затратить много сил и времени, чтобы эти идеи стали реальностью. Именно поэтому так необходим сегодня приток новых сил — исследователей, работающих на границе физики, химии, биологии и информатики, в эту переживающую младенческий возраст, но быстро взрослеющую область исследований.

И еще одно. Видный американский ученый, занимающийся проблемами молекулярной микроэлектроники, сотрудник компании «Дженекс» К. Ульмер недавно сказал: «Есть китайская пословица — путь в тысячу ли начинается с первого шага. Сегодня много тех, кто с интересом рассуждает, какой последний шаг нужно сделать, чтобы создать биочип. И очень мало тех, кто думает о первом шаге». Хотелось бы, чтобы те, кто сегодня работает или же будет работать в этой интересной области, имея в виду открывающиеся фантастические перспективы, ставили своей целью создать хотя бы простейшие, но реально работающие молекулярные устройства переработки информации.

Время идет быстро. В тридцатые годы, глядя на детекторный приемник, трудно было представить себе современную полупроводниковую электронику. И может быть, точно так же сегодня, несмотря на, казалось бы, сумасшедшие идеи, связанные с молекулярными электронными устройствами, мы еще очень плохо осознаем, к каким реальным последствиям они приведут.

*Академик Е. П. Велихов*

## **ВВЕДЕНИЕ. КАК И НА КАКОЙ ОСНОВЕ ВОЗНИКЛА МОЛЕКУЛЯРНАЯ МИКРОЭЛЕКТРОНИКА**

В 1982 г. в сентябрьском номере журнала «Чип» (так сокращенно называют в зарубежной литературе электронные интегральные микросхемы) появилась статья под названием «Биочипы грядут». В ней, в частности,

говорилось: «Однажды в воскресенье в маленьком городке США Роквилле в штате Мэриленд из церкви вышла женщина и подошла к своему мужу, который ждал ее около церкви, не разделяя ее религиозности. «Джеймс, — сказала она, — люди просили меня узнать, не придешь ли ты к нам, чтобы вместе возблагодарить господа бога». Мужчина отрицательно покачал головой и ответил: «Возвращайся к ним и объясни им, что я не только не верю во всемогущество бога, но, по-видимому, являюсь единственным, кто знает, как вскоре этого бога можно будет дополнить».

Кто же этот человек, разговор которого с женой звучит, как бред умалишенного?

Чтобы ответить на этот вопрос, нужно рассказать и о нем, и о новой технологии, в которой пока еще виднеется лишь верхушка айсберга. О технологии, которая переведет на совершенно новый уровень наше понимание и мышление, технологии, которая, как предполагают ее наиболее убежденные сторонники, позволит, в частности, имплантировать сверхминиатюрные устройства непосредственно в мозг человека, чтобы вернуть ему зрение, или же подключить к мозгу дополнительную огромную базу знания.

Эта сцена происходила четыре года тому назад. Заносчивого господина зовут Джеймс Мак Аликс. По специальности он биохимик, выпускник Гарвардского университета. Знающие его люди относят его к типу «неистового Билли Картера», одержимого массой идей. Однако в отличие от своего предшественника его жизнь — в науке. Его навязчивой идеей является биочип — электронная микросхема размером немногим более человеческой клетки, ансамбль биомолекул, которые могут сами себя воспроизводить.

Конечно, идею биочипа можно было бы отнести к области научной фантастики и, исходя из сегодняшнего уровня знаний, это было бы правильно. Но, как говорит сам Мак Аликс, «научной фантастикой является то, что будет реализовано через 10 или 15 лет. И создание биочипа попадет в этот период времени».

Цитированная статья — лишь одна из ряда зарубежных публикаций в журналах в основном научно-популярного толка, в которых в последние годы рассказывается о физических основах и перспективах нового направления — молекулярной микроэлектроники.

В основе ее лежат попытки найти пути создания сверхминиатюрных электронных микросхем — точнее, сверхминиатюрных устройств на молекулярном уровне для переработки и хранения информации, — используя в качестве элементной базы большие органические или биологические молекулы или же их сравнительно небольшие ансамбли.

Современная техника и технология, транспорт и связь, планирование и учет и многие другие структуры, обеспечивающие существование и развитие человеческого общества, немыслимы без широкого применения электроники. Основой быстрого развития этой области науки и техники было и остается до сих пор использование полупроводниковых неорганических материалов и планарной технологии производства микроминиатюрных электронных изделий. Именно этот технологический подход сделал широко доступными настольные вычислительные устройства, обладающие оперативной памятью в несколько мегабайт, привел к созданию вычислительных комплексов со скоростью переработки информации до ста миллионов арифметических операций в секунду.

Но несмотря на то что возможности планарной полупроводниковой технологии далеко еще не исчерпаны, уже сегодня становится очевидным, что в более или менее отдаленном будущем она перестанет удовлетворять потребности прикладных областей как по степени микроминиатюризации устройств, так и по скорости переработки информации. Поэтому многие исследователи ведут поиск принципиально новых решений и материалов, которые позволили бы резко расширить возможности электроники. Одно из таких направлений — молекулярная электроника, основанная на использовании органических и элементоорганических материалов.

Для органических и элементоорганических веществ в конденсированном состоянии (молекулярные кристаллы и полимеры, упорядоченные пленки и жидкие кристаллы) характерны довольно слабые межмолекулярные связи. Поэтому органическая молекула в конденсированной фазе во многом сохраняет свою индивидуальность, а свойства органического кристалла представляют собой своеобразное переплетение свойств индивидуальных молекул и коллективных свойств кристалла. Это позволит, по-видимому, создать на базе твердых органических и элементоорганических веществ устройства с более ши-

рокими, чем традиционные, и принципиально отличными от них возможностями.

Органические и элементоорганические материалы используются в электронике в основном в двух направлениях.

Первое, которому в основном и посвящена брошюра, представляет собой попытку создать устройства, принципиально отличные от традиционных по степени микроминиатюризации и скорости обработки информации. При этом, естественно, подразумевается отказ от традиционной элементной базы, схемотехники и т. д. Разработка этого направления и внедрение в практику молекулярных устройств должны представлять собой такой же важный этап в развитии электроники, как переход от вакуумной электронной лампы к транзистору, от транзистора — к интегральной схеме.

Второе, менее революционное, направление можно определить как разработку на базе органических материалов изделий и устройств, в основе которых заложены более традиционные физические принципы и схемотехника. В этом случае органические и элементоорганические материалы дают возможность использовать технологию более простую (в некоторых случаях), чем полупроводниковая. Поэтому могут быть улучшены эксплуатационные свойства и снижена стоимость изделий на базе органических материалов.

Работы в этом направлении широко ведутся. В нашей стране интересные исследования проводятся в Институте химической физики под руководством члена-корреспондента АН СССР А. А. Овчинникова и в ряде других научных центров. Об их результатах можно прочесть как в специальной, так и в научно-популярной литературе.

Почему же такой интерес вызывают органические соединения? Пожалуй, это связано с двумя причинами: во-первых, эти материалы значительно более разнообразны по своим структурным и физико-химическим свойствам, чем традиционные неорганические полупроводники и металлы, а во-вторых, они обладают весьма важной способностью непрерывно менять свою модификацию, позволяющей плавно и в нужном направлении менять их механические и физические характеристики.

Есть и еще одна причина интереса к органике, но она больше связана не с физическими, а с экологиче-

скими аспектами. Дело в том, что хотя основной материал полупроводниковой техники — кремний — в изобилии существует в природе, для его обработки требуются сильнодействующие и ядовитые вещества. А методы органического синтеза открывают более безвредные пути получения даже довольно сложных соединений. Очень перспективен в этом отношении так называемый синтез Меррифилда, позволяющий путем строго контролируемого присоединения звено за звеном строить довольно длинные молекулы.

В чем же природа большего разнообразия свойств органических молекулярных кристаллов по сравнению с неорганическими? Свойства металлов и их отклик на различные внешние возбуждения в основном определяются наличием электронов проводимости, свободно движущихся в решетке положительно заряженного остова. Эти электроны электростатически взаимодействуют с положительными ионами металлов, скрепляя их между собой. Реально почти все свойства металла определяются его электронной компонентой.

Ковалентные же и ионные кристаллы представляют собой жесткую решетку сильно связанных атомов и ионов, которые в кристалле полностью утрачивают свою индивидуальность. Например, свет взаимодействует со всем ковалентным кристаллом, как с единой системой. Это означает, что энергия фотона вызывает переход электрона не между отдельными энергетическими уровнями атома, а между валентной зоной и зоной проводимости, которые в процессе образования кристалла создаются в результате расщепления отдельных энергетических уровней атомов.

Молекулярный же кристалл больше напоминает «ориентированный молекулярный газ», чем привычные твердые тела. В частности, зонная теория — основной постулат традиционной физики твердого тела — к органическим молекулярным кристаллам в основном неприменима. Свойства же этих кристаллов сохраняют характерные особенности составляющих их органических молекул. Поэтому естественно ожидать, что молекулярные кристаллы будут столь же разнообразны по своим свойствам, как и сами органические молекулы, в отличие от довольно однообразных ковалентных и ионных кристаллов.

Среди огромного многообразия органических соеди-

нений наибольший интерес представляют кристаллы и полимеры с сопряженными связями. В дальнейшем нас больше всего будут интересовать именно они.

Рассмотрим в качестве примера бензол  $C_6H_6$  или полиацетилен  $(CH)_n$ . Разница между ними лишь в том, что первый по структуре представляет собой шестигульник, а второй — бесконечную цепочку. Молекула бензола (так же, как и полимер  $(CH)_n$ ) представляет собой плоскую структуру; все шесть атомов углерода и шесть атомов водорода жестко связаны  $\sigma$ -связями в плоскости молекулы. В то же время  $2p_z$ -орбитали углерода направлены перпендикулярно плоскости молекулы, параллельны друг другу и, перекрываясь, резонансно взаимодействуют.

В результате такого полисопряжения индивидуальные  $2p_z$ -орбитали углерода образуют коллективную молекулярную  $\pi$ -орбиталь делокализованных электронов, которая расположена симметрично над и под плоскостью молекулы. Эти делокализованные  $\pi$ -электроны имеют сравнительно низкую энергию электронного возбуждения, небольшую энергию ионизации, высокую молекулярную поляризуемость и как наружные электроны определяют основные оптические и электронные свойства вещества.

Введение в цепь сопряжения гетероатомов (N, O и S) сильно меняет электронные свойства молекулы. Эти атомы имеют пары неподеленных  $n$ -электронов, которые могут участвовать как в образовании межмолекулярной донорно-акцепторной связи, так и в генерации свободных носителей.

Особенно интересны квазиодномерные металлы, комплексы с переносом заряда и ион-радикальные соли. И вообще, если на первом этапе возникновения интереса к органическим кристаллам их рассматривали как потенциальных конкурентов и возможных заменителей неорганических полупроводников, то на втором этапе выяснилось, что они проявляют новые, совершенно неожиданные свойства; дополняющие свойства неорганических материалов.

На протяжении последних нескольких лет на базе молекулярной электроники активно развивается ее новая ветвь — молекулярная микроэлектроника (биоэлектроника, биотика, электроника в колбе и т. д.). Возвращаясь к проблемам этого направления, хотелось бы



справедливости ради отметить, что подобные предложения возникали и ранее, в основном в литературе научно-популярного характера. Но, как правило, они не выходили за рамки чисто спекулятивных пожеланий использовать исключительные свойства живых биологических систем — громадную информационную емкость человеческого мозга и его способность к ассоциативной переработке информации, интереснейшие информационно-логические процессы в клетке и простейших биосистемах.

Неоднократно высказывались предположения о том, что именно на этих принципах можно построить вычислительные системы ассоциативного типа, обладающие гигантской информационной емкостью, способностью к параллельной обработке информации и т. д. Тем не менее только в последнее десятилетие эти в основном умозрительные предположения начали выливаться в реальные направления исследований.

В основе этих работ лежит стремление создать объективную теоретическую и технологическую базу, из которой следовала бы сама возможность конструирования и изготовления молекулярных агрегатов, способных выполнять функции простейших логических элементов, на которых построена современная микроэлектроника. Кроме того, необходимо разработать технику объединения этих элементов в единую систему переработки информации.

Речь идет не о синтезе искусственных систем типа человеческого мозга и даже более простых организмов на клеточном уровне и использовании их для решения практических задач. Эта проблема так далека от детального понимания, что сейчас трудно даже представить себе, насколько для практического применения полезны отрывочные сведения об информационных аспектах функционирования живых систем.

Изучаются возможности построения принципиально новых информационно-логических систем из отдельных молекул или из их агрегатов, в том числе из «элементарных кирпичиков», образующих живые биологические системы и обладающих специфическими, интересными с точки зрения применения их в электронике свойствами.

Интерес к этому направлению обусловлен уникальными перспективами, которые откроются в том случае,

если молекулярные агрегаты действительно смогут быть использованы в качестве элементов информационных систем. Так, один из пионеров в этой области исследований, Дж. Мак Алир, упоминавшийся в начале этого раздела, оценивает возможную плотность размещения молекулярных элементов в трехмерной системе как  $10^{15}$  мм<sup>-3</sup>. По его же оценкам, плотность размещения элементов в молекулярном микроэлектронном устройстве может оказаться в  $10^6$  раз больше, чем в нервных волокнах, а скорость передачи информации — в  $10^6$  раз выше.

Необходимо при этом отметить, что детально разработанных предложений по схемотехнике, основанной на молекулярных элементах, пока нет. В литературе описываются лишь теоретические модели молекулярных устройств, демонстрирующие различные возможности передачи информации. На первой странице обложки показана одна из подобных моделей, обсуждаемая Мак Алиром. На субстрате из слоя синтетического белка линейно расположены другие белковые молекулы, синтезированные биологическим путем. На самом деле они должны быть как бы склеены друг с другом, но на рисунке они показаны отдельно, чтобы яснее были видны их соединения с субстратом. На этих белках расположены органические молекулы, в данном случае — молекулы порфирина, содержащие в центре конденсированной системы атом железа.

На такой модели демонстрируется возможность создания цепей и соединений, способных передать логическую информацию. Передающие информацию электроны могут передвигаться от одного атома железа к другому вдоль оси набора порфириновых колец или двигаться от субстрата к расположенным на нем белкам, что в принципе позволяет образовать логическую цепь типа «Данет», управляемую электрическим потенциалом. Наконец, по такой системе возможно распространение солитона, локальной волны возбуждения, вдоль углеродной цепи, присоединенной к порфириновому ядру.

Исследования в области молекулярной микроэлектроники развиваются очень быстро. Первая теоретическая работа под названием «Молекулярный выпрямитель» была опубликована А. Авирамом, сотрудником фирмы ИБМ, и М. Ратнером из Университета штата

Нью-Йорк в 1974 г. и, казалось бы, не вызвала широкого резонанса. Однако несколькими годами позже Ф. Картер, работающий в Военно-морской исследовательской лаборатории США, выполнил оценку перспектив создания элементной базы на молекулярном уровне. Он же выступил в роли организатора конференций по молекулярным электронным устройствам, которые привлекли внимание известных ученых США и ряда других стран и вызвали интерес некоторых крупных промышленных компаний. Одновременно с этим Дж. Мак Алир основал компанию «Электромолекуляр венчерс», преобразованную им позже совместно с Дж. Верунгом в компанию «Жеитроникс». По словам Верунга, программа этой компании в области молекулярной микроэлектроники не рассчитана на достижение крупных практических результатов в ближайшие годы. Более близкими по практическому использованию должны быть работы по биомембранам, биосенсорам, биопроводникам и биопротезам. Перспективные исследования использования методов генной инженерии для создания молекулярной элементной базы электроники ведутся К. Ульмером в компании «Дженекс корпорейшн».

Мы сделали попытку собрать воедино литературный материал, имеющий отношение к проблемам молекулярной микроэлектроники. Естественно, что в отдельных аспектах изложение будет неминуемо поверхностным и ограниченным проблемами рассматриваемой области. В то же время там, где это окажется возможным, мы попытаемся не только изложить литературный материал, но и оценить достоверность соображений, предлагаемых авторами конкретных работ.

## **ОСНОВНЫЕ ПРИНЦИПЫ СОЗДАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ УСТРОЙСТВ ХРАНЕНИЯ И ПЕРЕРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ**

Каждый новый этап в развитии способов обработки информации (по сути дела — в повышении эффективности переработки информации и сложности информационных систем), естественно, определялся имеющимися в распоряжении общества техническими средствами. И наоборот, стимулом создания новых технических

средств переработки информации являлись постоянно растущие информационные потребности общества.

Фактически до начала прошлого столетия наука, техника, обмен информацией и т. д. обходились простейшими, примитивными механическими устройствами, вершиной которых является созданный Блезом Паскалем механический арифмометр. Но именно в начале XIX в. резко возросла необходимость переработки больших объемов информации и прежде всего выполнения вычислений с большими массивами чисел (например, обработка геодезических измерений методом наименьших квадратов). Это вызвало к жизни до сих пор все ускоряющийся процесс совершенствования технических средств, тесно связанный с созданием новой идеологии переработки информации.

Революционным шагом явилась мысль, высказанная в 50-е гг. прошлого столетия Чарлзом Бэббиджем, о разделении алгоритма обработки информации и технических средств, на которых она производится. Но реализация этого проекта на базе механических элементов типа зубчатых колес, рычагов, штифтов и т. д. оказалась практически невозможной, и идея Бэббиджа почти сто лет ждала своего осуществления.

Здесь проявил себя один из основных законов информационных систем: каждая элементная база ставит свои пределы сложности систем, синтезируемых из данных элементов.

В 30-х гг. советский ученый В. И. Шестаков и затем К. Шеннон обнаружили явную аналогию между формулами исчисления высказываний и поведением релейных электрических схем. Тем самым логические операторы, с помощью которых можно реализовать любой алгоритм, нашли свое воплощение в электромеханических реле, ознаменовав новый этап в развитии элементной базы, которая и позволила в 40-х гг. создать первую вычислительную машину. Это был многотонный гигант, с трудом размещающийся в огромном зале, который на деление двух чисел затрачивал секунды.

Особенно резко ускорился процесс создания новой технической базы в послевоенные годы. В его основе лежала идеология известного математика Дж. фон Неймана, предложившего принцип гибкого программного управления обработкой информации на базе вычислительных устройств с последовательно выполняемыми



операциями и хранимой в памяти ЭВМ вычисляемой программой. ЭВМ, построенные по этому принципу, получили название фоннеймановских.

За послевоенные годы в качестве технической базы последовательно использовались вакуумные электронные лампы, кристаллические полупроводниковые транзисторы, полупроводниковые интегральные схемы, построенные на базе планарной технологии, большие и сверхбольшие интегральные схемы. Этим этапам отвечала последовательно увеличивающаяся степень миниатюризации и надежности устройств, что в настоящее время привело к созданию приборов, у которых на площади  $\sim 1 \text{ см}^2$  размещается несколько десятков тысяч элементов.

Однако уменьшение размеров элементов и увеличение степени интеграции полупроводниковых устройств не беспредельно. Детальное изучение физических принципов работы твердотельных элементов приводит к ограничениям размеров транзисторов, которые, как оказывается, не могут быть меньше чем  $0,1\text{—}1 \text{ мкм}$ .

Другой мыслимый путь уменьшения размеров элементов — переход на принципиально иную элементную базу, когда роль отдельных элементов будут играть молекулы или сравнительно небольшие их ансамбли.

Принципы твердотельной электроники ставят предел и сложности интегральных схем. Так, степень сложности современных интегральных схем не может превышать величину  $10^8$  элементов на кристалл, причем для не очень быстродействующих схем. Для быстродействующих же устройств степень интеграции, как это можно оценить, исходя из конечности скорости распространения света, не превышает  $10^2$  элементов. Устройства, использующие в качестве элементов молекулы, не имеют таких ограничений. Так, если принять за средний линейный размер молекулы  $100 \text{ \AA}$ , то в  $1 \text{ см}^3$  может разместиться не менее  $10^{18}$  элементов, что превышает все число элементов, созданных современной электронной промышленностью.

Обратимся еще к одному аспекту, связанному с переработкой информации. Хотя сама по себе информация не несет энергии, но ее хранение и переработка связаны с энергетическими и материальными затратами. В принципе информационную переработку можно проводить на слабых по содержанию энергии сигналах. Соб-

ственно говоря, именно для этого она и предназначена. Нижняя оценка затраты энергии на получение 1 бита информации равна  $kT \ln 2$ , где  $k$  — постоянная Больцмана; при  $T = 300 \text{ К}$  это составляет  $2 \cdot 10^{-21} \text{ Дж}$ . В современных же компьютерах требуются огромные ( $10^8\text{—}10^{10}$ )  $kT$  на бит энергетические затраты, весьма далекие от предела Бриллюэна. Молекулярные же устройства приближаются к минимальному пределу, характеризующему энергетику вычислительных устройств.

В конце 40-х — начале 50-х гг., на заре развития электронной вычислительной техники, разрабатывались и конкурировали друг с другом два основных пути создания электронных вычислительных устройств: аналоговый и цифровой.

Аналоговые устройства моделировали какой-либо процесс, описываемый уравнениями определенного типа, и поэтому могли использоваться для быстрого нахождения решений этих уравнений при заданных начальных условиях.

Цифровые ЭВМ, построенные в соответствии с принципами фон Неймана, являлись универсальными устройствами, способными решать большую совокупность разнообразных по своему характеру задач. Универсальность цифровых ЭВМ в сочетании с быстрым прогрессом технологии их производства привели к тому, что в настоящее время они составляют подавляющую часть устройств переработки и хранения информации.

Сегодня в развитии молекулярной микроэлектроники наблюдается формально аналогичная ситуация.

С одной стороны, большое число исследований посвящено изучению путей создания больших молекул и молекулярных ансамблей, способных выполнять функции элементной базы современных цифровых ЭВМ. В случае успеха этот путь должен привести к новому уровню миниатюризации традиционных по архитектуре ЭВМ за счет резкого уменьшения размеров каждого элемента.

С другой стороны, анализ специфических свойств больших органических и биологических молекул (значительное число устойчивых состояний молекулярной системы, сравнительная легкость построения распределенных функциональных элементов и т. д.) приводит к выводу о том, что молекулы и молекулярные ансамбли могут быть в неменьшей степени пригодны для построе-

ния аналоговых или сходных с ними устройств. В частности, представляют большой интерес предложения использовать аналоговые молекулярные устройства для решения задач искусственного интеллекта — распознавания образов, выполнения сложных логических операций и т. п.

Но и в том и в другом случае в молекулярной микроэлектронике можно выделить три основные линии исследований:

— «конструирование» молекул и молекулярных ансамблей, способных хранить, передавать и преобразовывать информацию (будем называть эти молекулы и молекулярные ансамбли элементами независимо от того, для построения каких устройств — аналоговых или цифровых — они используются);

— разработка новой схемотехники, оптимально использующей особенности молекулярных элементов;

— создание технологии производства молекулярных микроэлектронных устройств, в том числе применение для этой цели методов геной инженерии.

Но прежде чем перейти к обсуждению проблем конструирования, рассмотрим некоторые специфические особенности молекулярных элементов на примере одного из возможных умозрительных вариантов, когда отдельные молекулы используются в качестве логических элементов, а управление ими и передача информации осуществляются за счет оптических воздействий и оптической связи.

Систему переработки информации любой сложности можно построить исходя из комбинаций любых двух логических элементов типов НЕ, И и ИЛИ.

Казалось бы, атомные или молекулярные системы с их дискретными уровнями энергии идеально подходят в качестве основных логических элементов. Рассмотрим, например, процессы возбуждения электронных или колебательно-вращательных состояний атома (иона) или многоатомной молекулы монохроматическим излучением (рис. 1), предполагая, что в исходном атоме или молекуле основной уровень заселен и возбуждение того или иного уровня квантами излучения происходит с вероятностью, равной единице. При этом, естественно, будем исходить из того, что переходы между рассматриваемыми состояниями разрешены.

Нетрудно видеть (рис. 1, а), что в случае молекулы

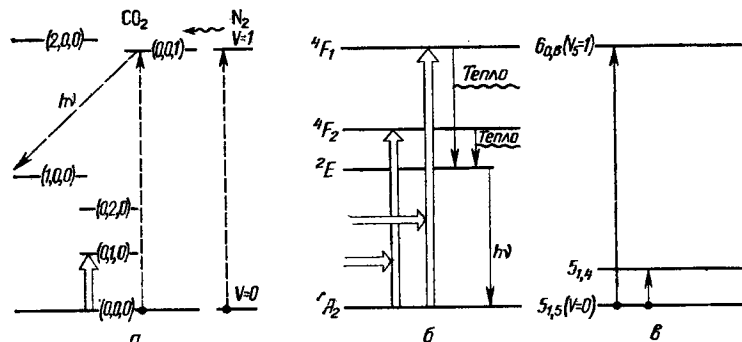


Рис. 1. Схема энергетических уровней и переходов между ними: а — система молекула  $\text{CO}_2$  + молекула  $\text{N}_2$ ; б — ион хрома в кристалле рубина; в — колебательно-вращательный переход молекулы  $\text{H}_2\text{CO}$

$\text{CO}_2$  возбуждение уровня  $(0,0,1)$  с последующим испусканием кванта за счет перехода  $(0,0,1) \rightarrow (1,0,0)$  можно исключить, возбудив молекулу на уровень  $(0,1,0)$ . Это будет соответствовать элементу типа НЕ. Возбуждение иона хрома в кристалле рубина (рис. 1, б) излучением с частотой  $\nu_1$  или  $\nu_2$  приводит к —испусканию кванта (элемент типа ИЛИ — ИЛИ). Аналогичная ситуация возникает в случае смеси молекул  $\text{CO}_2$  +  $\text{N}_2$  (см. рис. 1, а), когда испускание кванта может происходить как за счет возбуждения уровня  $(0,0,1)$  молекулы  $\text{CO}_2$ , так и за счет столкновительной передачи молекуле  $\text{CO}_2$  колебательного возбуждения молекулы  $\text{N}_2$ . И наконец, одновременное возбуждение молекулы  $\text{H}_2\text{CO}$  инфракрасным и микроволновым излучением (рис. 1, в) приводит к возникновению резонанса (элемент типа И — И).

Тем не менее, казалось бы, очевидная возможность использования отдельных атомов и молекул в качестве логических элементов электронных устройств оказывается весьма проблематичной из-за специфических свойств атомно-молекулярных систем и требований, предъявляемых к логическим элементам.

Прежде всего для логического элемента должна быть характерна высокая надежность срабатывания при подаче на элемент управляющего воздействия.

Это в принципе невозможно, если рассматривать си-

стему «отдельная молекула — одиночный квант», поскольку вероятность возбуждения какого-либо молекулярного состояния всегда мала. Естественно, эту трудность можно преодолеть, если вынудить молекулу взаимодействовать с большим количеством квантов. Но при этом возникает новая проблема:

средняя мощность реакции элемента не должна быть намного меньше, чем средняя мощность воздействия.

В нашем случае это означает, что количество квантов на входе элемента в единицу времени не должно быть намного больше, чем на его выходе. В противном случае вероятность срабатывания элементов при объединении их в цепь будет падать по мере удаления от начала цепи. Нетрудно видеть, что для отдельных молекул это требование не выполняется. К нему, естественно, примыкает и дополнительное сходное требование:

КПД преобразования сигнала отдельным элементом должен быть близок к единице.

Это означает, что реакция молекулы при ее возбуждении должна быть однозначной и возбужденная молекула должна далее отреагировать однозначным образом. К сожалению, подобное требование также не выполняется, поскольку в общем случае при селективном возбуждении одного из состояний многоатомной молекулы с определенной вероятностью возможна дезактивация состояния за счет различных внутримолекулярных процессов и передача возбуждения на другие молекулы (например, по экситонному механизму в конденсированной фазе). Тем не менее следует отметить, что в больших биоорганических молекулярных системах КПД преобразования может быть высоким. Так, квантовый выход флуоресценции некоторых белков может быть близким к единице.

При переходе элемента из одного состояния в другое он должен оставаться в нем достаточно долго для того, чтобы следующее управляющее воздействие могло однозначно перевести элемент в новое состояние.

Это требование не выполняется для не очень сложных многоатомных молекул, поскольку возбужденные электронные или колебательные состояния обладают

временами жизни  $10^{-5}$ — $10^{-10}$  с. Тем не менее опять-таки следует отметить, что для больших биоорганических молекул нередко характерны возбужденные электронные триплетные состояния со временами жизни порядка десятков секунд.

Элемент должен переводиться управляющим воздействием в любое необходимое состояние. И это требование для рассмотренных молекулярных элементов не выполняется. Воздействие электромагнитного излучения легко переводит молекулу в возбужденное состояние. Однако обратный переход может быть спонтанным или плохо управляемым.

Таким образом, если практически невозможно создать устройство для преобразования информации на основе элементов из отдельных неорганических молекул или органических со сравнительно небольшим числом атомов, то использование для этой цели больших органических или биологических молекул значительно расширяет возможности. Еще больше облегчается задача создания молекулярных устройств, если есть возможность увеличить энергию возбуждения молекул за счет электромагнитного или корпускулярного воздействия или путем передачи энергии от носителей типа АДФ (аденозинтрифосфата), как это происходит в ряде биологических процессов.

По-видимому, использование в качестве логических элементов молекулярных ансамблей, при котором отдельные достаточно большие молекулы «работают» параллельно, также открывает интересные перспективы.

### Цифровые молекулярные устройства

В принципе целый ряд молекулярных систем может быть использован для построения устройств для запоминания и хранения информации. Такие системы должны удовлетворять определенным требованиям, а именно иметь не менее двух различных устойчивых состояний с достаточно большими временами жизни. Кроме того, необходимо иметь возможность избирательно переводить молекулярную систему в каждое из этих состояний управляющим физическим воздействием и определять, в каком именно состоянии находится система.

Как уже говорилось выше, времена жизни возбуж-

денных молекулярных состояний невелики. Однако если быть точными, это утверждение можно отнести лишь к синглетным электронным состояниям, к которым обычно принадлежит основное состояние молекулы и для которого характерна антипараллельность спинов двух электронов, занимающих соответствующую орбиталь. Но кроме синглетных состояний  $S_0$ ,  $S_1$ ,  $S_2$  ... в молекулах может существовать система триплетных состояний  $T_1$ ,  $T_2$ ,  $T_3$  ... Вероятность возбуждения триплетных состояний из основного синглетного мала, соответственно время жизни их велико.

При определенных условиях некоторые вещества сравнительно легко переходят в триплетное состояние. Так, водный раствор красителя родамина В при быстром, охлаждении до температуры сухого льда или жидкого азота перестает флуоресцировать. Но в то же время ультрафиолетовое излучение приводит к заселенности возбужденных триплетных состояний с большими временами жизни (десятки секунд и более).

Таким образом, если вырастить на прозрачной подложке тонкую пленку твердого раствора родамина В (или другого красителя с еще большим временем жизни триплетных состояний), то, используя для записи и считывания двоячной информации монохроматическое излучение, можно на основе таких элементов создать запоминающее устройство. Используя в качестве управляющего воздействия лазерный луч диаметром 1 мкм, плотность записи получим порядка  $10^8$  бит/см<sup>2</sup>. При этом в информационном объеме, отвечающем одной ячейке записи (диаметр луча 1 мкм, расстояние между центрами ячеек 3 мкм, толщина пленки 0,1 мм, концентрация красителя — 1 молекула на 1000 молекул воды), будет находиться  $10^8$ — $10^{10}$  молекул красителя, что достаточно для уверенного детектирования сигнала оптическими методами.

Существенный недостаток такого устройства — невозможность оперативной перезаписи информации с его помощью. Однако можно предложить и другие принципы записи информации на молекулярном уровне, свободные от этого недостатка. Одним из наиболее известных эффектов, которые могут быть для этого использованы, являются, по-видимому, электронно-конформационные перегруппировки.

Интересные результаты были получены на пленках

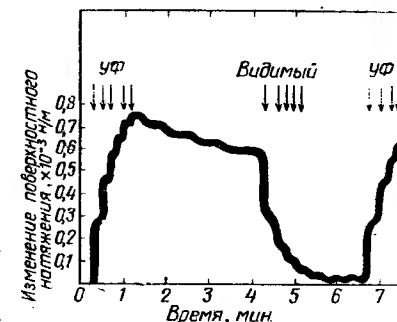


Рис. 2. Поверхностное натяжение в монослое сополимера спиробензпиран-метилметакрилат при воздействии на пленку ультрафиолетового и видимого излучения

Лэнгмюра—Блодже, построенных на основе сополимера метакрилата и спиробензпирана (изображенного в верхней части рис. 20), при изучении их фотохимической изомеризации. Реакция сопровождалась изменением цвета пленки и возникновением в ней механических напряжений. Очень важно, что эта реакция обратимая — она проходит под воздействием ультрафиолетового излучения ( $\lambda = 370 \pm 35$  нм) в прямом направлении и видимого света ( $\lambda = 390$  нм) — в обратном. Изменение поверхностного натяжения системы, свидетельствующее о ходе процесса полимеризации, показано на рис. 2.

Как возможные кандидаты на роль элементов запоминающих устройств большой интерес представляют молекулы, в которых проявляются внутримолекулярные водородные связи, и изомеры (таутомеры), в которых отдельные атомные группировки сравнительно легко могут переходить из одного положения в другое относительно достаточно жесткого молекулярного остова. Такой переход может происходить под действием электрического поля или оптического возбуждения. Поскольку при переходе атомных группировок из одного положения в другое должен меняться спектр вещества, распознавать состояние молекулярного элемента памяти, очевидно, можно по изменению его спектральных характеристик (рис. 3).

Кроме того, что использование молекулярных носителей само по себе значительно повышает пространственную плотность записи информации, за счет частотно-селективной записи в каждой пространственной точке полимерной пленки эта характеристика элемента возра-

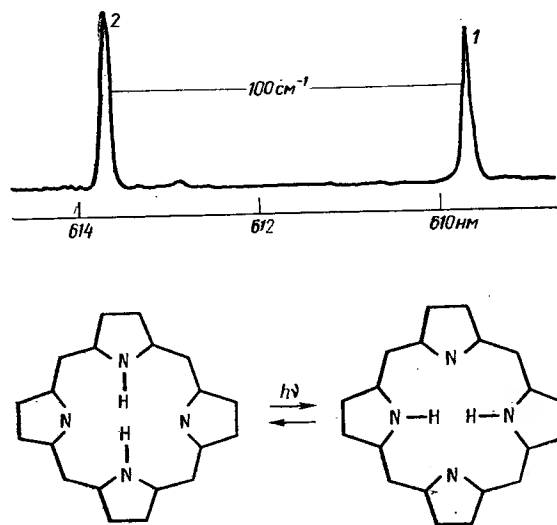


Рис. 3. Спектр возбуждения линии O—O перехода  $S_1 \leftarrow S_0$  для порфирина, отражающий разницу между двумя его формами в *n*-октано. Облучение на частоте линии 1 преобразует ее в линию 2, и наоборот.

стает еще в  $10^2$ — $10^3$  раз и может достигнуть величины  $10^{11}$  бит/см<sup>2</sup>.

Механизм оптической частотно-селективной записи основан на явлении «выжигания провала» в широких полосах поглощения примесных органических молекул в твердотельных матрицах. Явление, открытое и изученное школой члена-корреспондента АН СССР К. К. Ребана, группой Р. И. Персонова и другими исследователями, состоит в том, что если лазерным лучом с частотой  $\omega_0$  осветить образец, содержащий примесные молекулы, то в спектре поглощения примесных молекул образуется узкий провал на этой частоте, который в темноте и при гелиевых температурах сохраняется достаточно долгое время (рис. 4).

Для практического использования описанного эффекта необходимо знать, каковы времена жизни провала и его выжигания. Рассмотрим более подробно, чем определяются эти характеристики.

Обширные экспериментальные данные свидетельст-

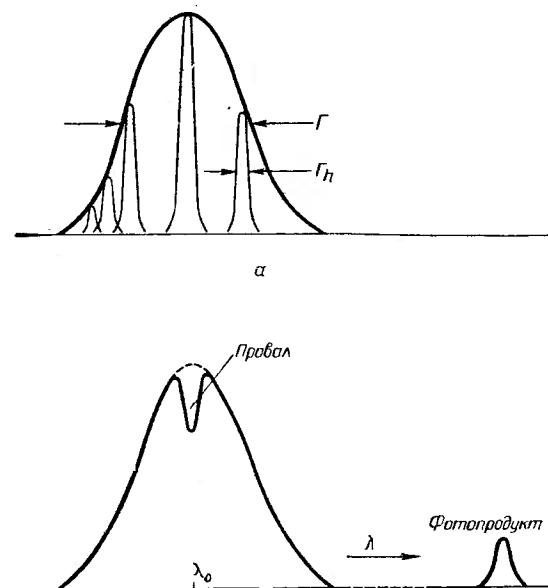


Рис. 4. Схематическое представление неоднородно уширенной линии поглощения ( $\Gamma$  — полуширина линии), полученной в результате наложения однородно уширенных линий (их полуширина  $\Gamma$ ), находящихся в различном окружении (а); б — профиль линии поглощения после облучения лазером с длиной волны  $\lambda_0$ ; показан также профиль линии фотопродукта

вуют, что многие органические молекулы не имеют структурного оптического спектра. Объясняется это обычно тем, что молекула в растворе (в том числе и в твердом) во многих отношениях ведет себя аналогично примесному центру кристалла. Тогда каждому электронно-колебательному переходу в спектре примесной молекулы соответствует полоса, которую в общем случае можно представить в виде суммы двух членов

$$I(\omega) = G(\omega) + \Phi(\omega),$$

где функция  $G(\omega)$ , имеющая вид острого пика, описывает бесфононную линию, а функция  $\Phi(\omega)$  — фононное крыло, сопутствующее этой линии.

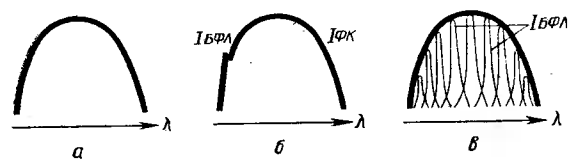


Рис. 5. Возможные случаи происхождения спектральных полос большой ширины:  
а — сильное внутримолекулярное взаимодействие; б — сильное электрон-фононное взаимодействие; в — неоднородное уширение

Широкие полосы в спектрах органических молекул (рис. 5) могут возникать за счет сильных внутримолекулярных взаимодействий, приводящих к фотохимической реакции типа диссоциации, что обуславливает отсутствие дискретных уровней у сложной молекулы в возбужденном состоянии; сильного электрон-фононного взаимодействия, при котором молекула хотя и имеет дискретные уровни, интенсивность бесфононной линии мала, а широкие спектральные полосы являются проявлением развитых фононных частей спектра. И наконец, широкие полосы в спектре могут возникать в результате наложения бесфононных линий, отвечающих различным локальным условиям для отдельных молекул в матрице при слабом электрон-фононном взаимодействии, когда молекула достаточно «жесткая» и ее спектр состоит из бесфононной линии и слабого фононного крыла.

Провал в полосе поглощения можно выжечь монохроматическим лазерным излучением только в последнем случае. Это явление возникает благодаря высокой интенсивности бесфононной линии, если после поглощения света не равна нулю вероятность того, что с молекулой что-либо произойдет и она не вернется точно в исходное состояние. Независимо от конкретной природы фотопревращения необходимо, чтобы рассматриваемый энергетический переход либо вообще исчезал, либо в спектре фотопродукта происходил сдвиг, превышающий ширину исходного перехода (см. рис. 4). Для наблюдения эффекта выжигания провала фотопревращение должно быть необратимым в масштабе времени, необходимым для регистрации сигнала.

Фотопревращение может происходить либо медленно по сравнению с временами внутримолекулярных релаксационных процессов, либо быстро, и тогда именно процесс фотопревращения будет объектом изучения при выжигании провала.

Рассмотрим первый случай, когда несущественны детали конкретного механизма фотопревращения.

Известны два типа процессов, в результате которых в неоднородно уширенных спектрах примесных центров возникают устойчивые провалы. Процессы первого типа связаны с фотохимическими превращениями селективно возбужденных молекул: фотоизомеризацией, переориентацией водородной связи, фотодиссоциацией или двухступенчатой ионизацией. Процессы второго типа могут происходить с фотохимически стабильными молекулами и по природе своей являются фотофизическими. Это поворот молекулы или части ее относительно матрицы, изменения в самой матрице, переход молекулы в долгоживущее триплетное состояние или, наконец, туннельные процессы в аморфных материалах матрицы, обусловленные межчастичным потенциалом, имеющим форму двух ям.

Классификация эта в достаточной степени условна. Но независимо от конкретной природы процесса необходимо, чтобы в результате фотопревращения спектральный переход либо вообще исчезал, либо претерпевал частотный сдвиг, превышающий однородную ширину исходного перехода.

Рассмотрим примесную молекулу в твердом растворе, которая под действием света может переходить в другую форму (фотопродукт). В настоящее время в общем известны средние времена различных внутримолекулярных процессов. Считается, что поглощение света молекулой в основном электронном состоянии происходит за время  $\sim 10^{-15}$  с, излучательные времена синглетных состояний составляют  $10^{-6}$ — $10^{-9}$  с, триплетных —  $10^{-2}$ — $10^2$  с. Переход синглет — триплет происходит за  $\sim 10^{-9}$  с, а обратный переход — за время  $10^{-4}$ — $10^2$  с.

Быстро, за время  $\sim 10^{-12}$  с, происходит релаксация колебательных состояний конкретного синглетного или триплетного уровня; при этом возможны как излучательные, так и безызлучательные переходы. Энергии колебательных молекулярных переходов, как правило, низ-



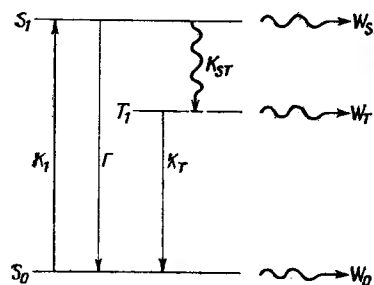


Рис. 6. Трехуровневая модель, используемая для рассмотрения фотохимических реакций примесных молекул в твердотельной матрице (сплошными линиями показаны процессы поглощения и испускания света, волнистыми — безызлучательные переходы и фотохимические реакции)

ки по сравнению с энергиями электронных переходов. Поэтому константы скоростей для колебательных переходов оказываются много меньше, чем для электроинных, и безызлучательные механизмы доминируют в процессах колебательной релаксации.

Внутреннюю конверсию с нижнего возбужденного синглетного уровня на один из колебательных уровней основного электронного состояния многие авторы считают несущественной. По-видимому, константу скорости этого процесса можно принять равной  $\sim 10^{-8} - 10^{-6}$  с.

Сравнительно мало известно и о константах скоростей фотохимических процессов, которые могут протекать с участием как основных, так и возбужденных молекулярных электронных состояний. Очевидно, что из-за затрудненной диффузии, малых сечений соударений и т. д. в твердых растворах маловероятны бимолекулярные фотохимические реакции. Более вероятны реакции фотоизомеризации и другие мономолекулярные процессы.

Итак, оптимальная физическая модель для рассмотрения фотохимической реакции в твердотельной матрице представляет собой как для исходной молекулы, так и для фотопродукта трехуровневую систему ( $S_0$ ,  $S_1$ ,  $T_1$ ). Эта система (рис. 6) в основном состоянии  $S_0$ , возбужденном светом синглетном  $S_1$  и полученном за счет внутренней конверсии триплетном состоянии  $T_1$  может претерпевать фотопревращения с вероятностями  $W_0$ ,  $W_s$ ,  $W_t$  соответственно. Исследуя кинетику этой модели, можно полностью описать как временную зависимость спектра, так и форму провала.

Время жизни провала в рамках рассмотренной модели также можно легко определить. После прекращения лазерного воздействия происходит быстрая релак-

сация в основное состояние и обратное превращение фотопродукта. Время жизни провала определяется через вероятность обратного превращения фотопродукта  $W'$  и равно  $1/W'$ .

Экспериментальное определение  $W'$  показывает, что для ряда исследованных молекул времена жизни провалов измеряются по крайней мере часами (в темноте, при гелиевых температурах). Что касается времени выжигания провала, то в известных в настоящее время экспериментальных работах оно составляет секунды или десятки секунд. Естественно, это исключает возможность записи достаточно больших объемов информации (правда, при сравнительно невысоких интенсивностях лазерного излучения, использующихся в экспериментальных исследованиях).

Тем не менее сотрудники фирмы ИБМ объявили о своем намерении разработать оптическую память с частотно-селективной записью информации емкостью  $10^{11}$  бит/см<sup>2</sup>. Они намерены использовать для этого кристалл фтористого натрия с центрами окраски, в спектральной полосе которого с максимумом 575 нм и шириной 100 ГГц ( $\sim 0,1$  нм) можно выжигать провалы шириной 50 МГц. Предполагается, что время записи информации может быть таким образом доведено до 30 нс на бит. Считывание информации должно будет проводиться полупроводниковым лазером на галлий-мышьяковых структурах в режиме модуляции частоты излучения, что позволит работать на провалах небольшой глубины. Стирать информацию можно, нагревая образец или освещая его широкополосным излучением (и то и другое ускоряет обратные фотохимические процессы).

Все же хотелось бы отметить, что рассмотрение в этом разделе возможностей хранения информации не является описанием реально существующих устройств. Для их создания необходимо еще провести большую исследовательскую и опытно-конструкторскую работу. Здесь, как и в последующем изложении, намечены лишь направления исследований, обещающие существенное улучшение характеристик конкретных приборов.

Существует несколько механизмов передачи информации или энергии от одной молекулы к другой или между разными молекулами. Некоторое представление об основных их характеристиках может дать табл. 1. В ней отмечены природа сигнала (или частиц), рас-

Таблица 1

Характеристики процессов  
передачи информации в молекулярных системах

Частица, несущая информацию	Степень дально- действия, нм	Структура цепи	Физическое явление	Управление сигналом
$H^-, H^+$	0,3	Асимметрич- ная водород- ная связь	Туннелирование в «молекуляр- ном диоде»	Перемена зна- ка приложенно- го потенциала
H	5	Цепочка с во- дородными свя- зями	Двойной пере- нос протона	Электрическое поле, оптиче- ское возбужде- ние
Фотон	3,5	Взаимодей- ствие диполь- диполь	Комплексы типа эксимеров	«Переворачи- вание» диполя
Экситон	5	1, 2, 3-размер- ные возбужде- ния	Коллективные возбуждения электрона	Ловушки воз- бужденных состояний
Фонон	10	Полимерная цепь	Молекулярные колебания в цепи	Размыкание цепи
Электрон	30	Электрон в по- ле периодиче- ского потенциа- ла	Резонансный туннельный эффект в пе- риодическом поле	Изменение формы потен- циальной ямы
Солитон	60	Пептидные $\alpha$ -спирали	Волна колеба- тельного воз- буждения	Изменение жесткости системы
Электро- солитон	60	Сопряжен- полиеновые цепочки	Уединенная волна неспа- ренного элек- трона	Электронные ловушки
		Пептид- ные $\alpha$ -спирали	Уединенная заряженная волна	Электронные ловушки
		Сопряженные полиеновые цепочки	Уединенная заряженная волна	Электронные ловушки
		Упорядоченные системы в со- лях тетрациа- нохинодиметана	Уединенная заряженная волна	Электронные ловушки
Протосо- литон	—	Цепочки водо- родных связей в структуре ти- па льда	Уединенная заряженная волна	Связывание протона

стояние, на которое осуществляется перенос, а также способ, которым может быть переключен сигнал. Для передачи информации наиболее перспективны, по-видимому, электронная проводимость протяженных молекулярных фрагментов, процессы межмолекулярной передачи электронов, солитонный механизм передачи энергии и заряда по последовательности атомных групп внутри молекулы, и внутри- и межмолекулярная передача энергии по экситонному механизму.

Электронная проводимость протяженных молекулярных систем, т. е. процесс передачи электрона от донорной к акцепторной группировке по цепи атомов, привлекала внимание многих исследователей. Наиболее интересными с этой точки зрения являются сопряженные (полиеновые, полиацетиленовые и т. д.) системы,  $\pi$ -электроны которых, перекрываясь, образуют протяженные молекулярные орбитали.

Ряд полимеров, кроме транс-полиацетилена, должны обладать диэлектрическими свойствами уже по своей основной структуре. Таковы, например, цис-полиацетилен, полипиролы и др. В транс-полиацетиле из четырех валентных электронов три образуют целиком заполненную зону и не могут участвовать в электропроводности. Четвертый электрон принадлежит цепи сопряжения, т. е. всей полимерной системе.

Интерес к таким системам обусловлен тем, что они могут рассматриваться как «молекулярные провода», соединяющие элементы молекулярного прибора. Однако эти «провода» вряд ли можно использовать так, как это делается в обычных электронных устройствах, в качестве проводников. Разница состоит в том, что эти полимеры представляют собой квазиодномерную систему, которая по своим свойствам существенно отличается от обычных трехмерных систем.

Так, атомы с одним валентным электроном, образующие одномерную периодическую решетку с малым межатомным расстоянием, должны были бы проявлять металлические свойства. Однако, как это было отмечено Р. Пайерлсом, такая система оказывается неустойчивой. Он рассмотрел модель одномерного металла, в которой каждый электрон считался независимым от других и находился в самосогласованном поле сил, создаваемом решеткой и коллективным действием других электронов. Тогда состояние с меньшей энергией будет

реализовано, если решетка слегка деформируется. Соседние пары атомов сдвинутся друг к другу, при этом период решетки увеличится вдвое. Это можно представить так, что вместо цепочки атомов образуется система, аналогичная молекулярному водороду, которая представляет собой диэлектрик.

Любое возбуждение в периодической кристаллической системе и, в частности, возбуждение электрона, не локализовано, а размывается по всей системе. Однако в одномерной системе состояния электрона локализованы при сколь угодно слабом хаотическом потенциале. Это означает, что наличие в такой системе любого дефекта приведет к тому, что проводимость не будет металлической, а электрон будет захвачен дефектом.

Учет в полной мере кулоновского взаимодействия между электронами представляет сложную математическую задачу, не решенную в настоящее время. Обычно это взаимодействие учитывают только в рамках некоторых приближенных моделей.

Анализ простейшей модели одномерной системы атомов, учитывающей кулоновское взаимодействие только тех электронов, которые находятся на одном атоме (модель Хаббарда), показывает, что в системе электронов с наполовину заполненной зоной одноэлектронные возбужденные состояния отделены от основного состояния энергетической щелью. Это значит, что проводимость такой системы не может быть металлической.

По-видимому, в реальных системах учет кулоновского взаимодействия и пайерлсовской неустойчивости не приведет к существенно иным результатам. Эта гипотеза подтверждается наблюдаемым на опыте чередованием длин связей углерод — углерод, а также наличием щели в электронном спектре сравнительно коротких цепочек.

Таким образом, по крайней мере по трем упомянутым причинам одномерная система не может в основном состоянии быть металлической. Однако в какой мере эти соображения применимы к полимерным системам, в которых движение электронов не является строго одномерным, в настоящее время не ясно.

Одно из возможных объяснений явления переноса электрона в живых системах на большое расстояние связано с предположением о том, что этот процесс облегчается участием в нем белковых молекул. Высказы-

валось предположение, что белки могут осуществлять перенос внешних электронов, поступающих от донорной молекулы, присоединенной к белку. При этом предполагается, что если такой электрон попадает в зону проводимости, то он может по ней перемещаться.

Если к белковой  $\alpha$ -спирали присоединена донорная молекула, то ее волновая функция, естественно, меняется по сравнению с функцией изолированной молекулы и, главное, становится отличной от нуля на протяжении всей белковой молекулы. Если к одной из пептидных групп присоединена акцепторная молекула, то возможен перенос электрона от донора к акцептору. Таким образом, белковая молекула способствует переносу электрона от донора к акцептору, при этом влияние ее сказывается только в том, что изменяются волновые функции донорной и акцепторной молекул. В свободных донорных и акцепторных молекулах электронные состояния локализованы в основном в объемах молекул, когда же они прикрепляются к белковым молекулам с квазипериодической структурой, волновые функции их размываются. Пространственное перекрытие этих функций и обеспечивает перенос электрона.

Для переноса электрона от донорной молекулы к акцепторной, вообще говоря, нет необходимости в строгой периодичности структуры белковой молекулы. Достаточно, чтобы между субъединицами существовало взаимодействие, обуславливающее последовательное перекрытие волновых функций электрона соседних структурных групп среды.

Большое значение для понимания возможностей молекулярной электроники играет эффект квантово-механического туннелирования электронов. С точки зрения классической физики электрон с энергией  $E$ , налетающий на потенциальный барьер (например, левый, рис. 7), должен в точке  $x_1(E)$  остановиться и отразиться назад. В квантовой механике существует определенная ненулевая вероятность частице оказаться около точки  $x_2(E)$ , т. е. просочиться сквозь барьер. Эта вероятность  $W_1$  зависит от ширины барьера  $d = x_2(E) - x_1(E)$ , его высоты и экспоненциально мала. Казалось бы, что если электрон налетает на два потенциальных барьера, изображенных на рис. 7, то вероятность прохождения должна определяться произведением  $W_1 \cdot W_2$ , где  $W_2$  — вероятность прохождения сквозь второй барьер, кото-

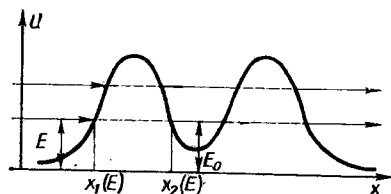


Рис. 7. Схема, иллюстрирующая резонансное тунелирование электронов

рая как и  $W_1$ , тоже экспоненциально мала. И это действительно так почти при всех энергиях. Однако если электрон налетает на барьер с энергией, равной энергии квазиуровня в центральной яме, то оба барьера, если они одинаковы, как будто уничтожаются, и электрон проходит сквозь них с коэффициентом прохождения, равным единице. Если же меняется либо глубина ямы, либо форма барьера, то коэффициент прохождения резко обращается в нуль. Тот же результат получится, если рассмотреть периодическую систему одинаковых потенциальных барьеров. Следовательно, в такой системе возможен как механизм передачи электрона на большое расстояние, так и эффективное выключение его.

Механизм этого резонансного тунелирования объясняется своеобразной интерференцией. Как известно, с движением электрона можно связать некий волновой процесс. После прохождения левого потенциального барьера происходит частичное отражение волны, отвечающей электрону в точке  $x_2(E)$ . Часть волны, прошедшая в область потенциальной ямы, отражается на правой стенке потенциальной ямы. Если она встретится с предварительно отраженной волной в противофазе, то они взаимно погасят друг друга, и останется только прошедшая волна. Количественный расчет показывает, что это как раз возникает при условии совпадения энергии налетающего электрона с энергией квазиуровня в яме.

Другим чрезвычайно важным способом передачи энергии, электрона или протона по цепи связанных атомов является солитонный механизм. Солитон, или уединенная волна, представляет собой локальное возмущение, распространяющееся в нелинейной среде, обладающей дисперсией. Начавшись с отдельных конкретных задач, изучение нелинейных систем показало, что соли-

тонные механизмы, по-видимому, являются универсальными, характерными для любых нелинейных систем.

В молекулярных системах существует по крайней мере два типа нелинейных объектов, в которых могут распространяться солитоны. Первая — это полипептидные цепочки. Солитоны в них образуются при вибрационном возбуждении полипептидных групп в результате взаимного уравнивания дисперсии, связанной с резонансным взаимодействием внутривещных дипольных колебаний, и нелинейностью, вызванной связью этих колебаний с локальными смещениями равновесных положений пептидных групп.

Второй тип солитонных систем — это сопряженные полимеры, такие, как транс-полиацетилен, возможность существования солитонов в которых обусловлена вырожденностью основного состояния.

Основополагающую роль в изучении солитонных механизмов в органических и биологических молекулах и в использовании этих механизмов для объяснения ряда биологических явлений сыграла школа А. С. Давыдова. Он и его сотрудники детально рассмотрели ряд молекулярных моделей, адекватных полипептидным цепочкам и описывающих процессы передачи вдоль цепи энергии или электрона.

Обсудим несколько подробнее некоторые детали этого процесса. Пусть имеется система слабо связанных одинаковых молекул массы  $M$ , закрепленных в узлах линейной цепочки с периодом  $a$ . Каждая молекула может переходить в возбужденное состояние с энергией  $\epsilon$ . Между возбужденной и соседними с ней молекулами возникает диполь-дипольное резонансное взаимодействие, энергия которого есть  $G$ . При этом взаимодействие прежнего типа (ван-дер-ваальсовы и другие) изменяются на величину  $D$ . Связь молекулярных колебаний со смещением молекул из положений равновесия характеризуется параметром  $\chi$ , а продольная жесткость системы — параметром  $\kappa$ , определяющим скорость продольного звука  $v_0 = a \sqrt{\kappa/M}$ .

Можно показать, что в этом случае для рассматриваемой системы характерны два типа коллективных возбуждений: экситоны и солитоны.

Экситоны перемещаются вдоль цепочки со скоростью, большей чем  $v_0$ . При движении они тормозятся, излучая фононы, но не успевают вызвать локальную деформа-

цию цепочки. Их внутренняя энергия и эффективная масса равны

$$E_{\text{экс}} = \epsilon - 2G - D, \quad m_{\text{экс}} = \hbar^2/2a^2G.$$

Наиболее интересными оказываются возбуждения типа солитонов. Они представляют собой связанные состояния внутримолекулярного возбуждения и деформационных возбуждений цепочки. Внутренняя энергия солитона оказывается меньше, чем сумма энергий составляющих его возбуждений. Поэтому солитоны устойчивы и, обладая большей, чем экситон, массой и двигаясь вдоль цепочки со скоростью, меньшей  $v_0$ , не излучают фононов, т. е. распространяются вдоль цепи на достаточно большие расстояния без существенной диссипации энергии. Энергия солитона, отсчитанная от дна экситонной зоны, и его масса (при  $v \ll v_0$ ) равны

$$E_s = E_{\text{экс}}(0) - \frac{\chi^4}{3\kappa^2 G} = \epsilon - 2G - D - \frac{\chi^4}{3\kappa^2 G},$$

$$m_s = m_{\text{экс}} + \frac{4\chi^4}{3\kappa^2 G v_0^2} = m_{\text{экс}} + \frac{4M\chi^4}{3a^2\kappa^3 G} = m_{\text{экс}} \left(1 + \frac{8}{3} \frac{M\chi^4}{3\hbar^2\kappa^3}\right).$$

Ширина области возбуждения  $l$ , отвечающей солитону,  $l = \pi a \kappa^2 G / \chi^2$ .

Картина усложняется при рассмотрении модели, описывающей полипептидную цепочку. В этом случае (рис. 8) цепь пептидных группировок сворачивается в спираль, вдоль которой образуются три цепочки водородных связей. Для такой модели характерны два типа солитонных возбуждений. Несимметричному солитону (см. табл. 1) отвечает внутренняя энергия и масса

$$E_s^{\text{нс}}(0) = \epsilon - 2G - L - \frac{\chi^4}{12\kappa^2 G}; \quad m_s^{\text{нс}} = m_{\text{экс}} \left(1 + \frac{2}{3} \frac{M\chi^4}{\hbar^2\kappa^3}\right),$$

симметричному —

$$E_s^{\text{с}}(0) = \epsilon - 2G - 2L - \frac{\chi^4}{27\kappa^2 G}; \quad m_s^{\text{с}} = m_{\text{экс}} \left(1 + \frac{8}{27} \frac{M\chi^4}{\hbar^2\kappa^3}\right).$$

Здесь  $G$  — энергия резонансного диполь-дипольного

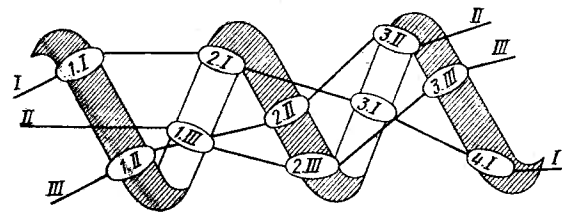


Рис. 8. Три цепочки водородных связей между пептидными группами (арабские цифры — номер группы) в  $\alpha$ -спиральной полипептидной цепи (римские цифры — номер цепи)

взаимодействия между соседними пептидными группами в одной и той же цепочке водородных связей,  $L$  — энергия взаимодействия соседних групп различных цепочек. Видно, что при увеличении энергии резонансного взаимодействия  $G$  и жесткости цепи  $\kappa$  уменьшаются различия в характеристиках экситонов и солитонов — увеличивается область локализации солитона, различия между массами экситона и солитона сглаживаются.

Электрон движется вдоль пептидной цепи так же, как колебательное возбуждение (электросолитон).

Поскольку дипольный момент пептидной группировки достаточно велик, электрон может образовать с ней локальное связанное состояние. Если учесть возможность смещения пептидных группировок из положений равновесия, то механизм перехода электрона вдоль возможных связанных состояний в цепи таких группировок оказывается подобным механизму движения солитона. Иными словами, можно показать, обозначая через  $\chi$  параметр, характеризующий изменение энергии электрона при смещении пептидной группировки, что энергия и масса электросолитона равны

$$E_{\text{эс}}(0) = E_0 - \frac{ma^2\sigma^4}{12\hbar^2\kappa^2}, \quad M_{\text{эс}} = m \left(1 + \frac{M\sigma^4}{6\hbar^2\kappa^2}\right),$$

где  $E_0$  — энергия, отвечающая дну зоны проводимости,  $m$  — масса электрона.

Более того, оказывается, что электроны, образующие электросолитон, могут образовывать пары, составляя более тяжелую устойчивую квазичастицу с массой, примерно равной удвоенной массе электросолитона. Иначе говоря, механизм передачи электрона вдоль молекулярной цепи на достаточно большие расстояния подобен механизму сверхпроводимости.

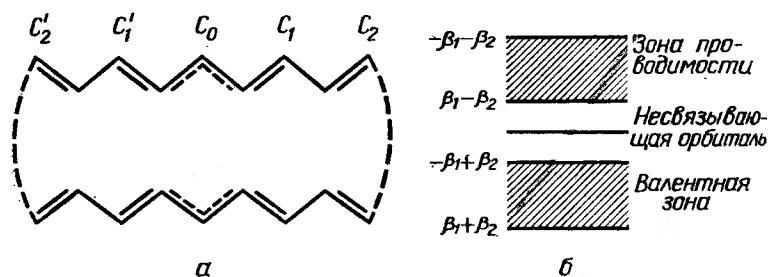


Рис. 9. Схема расчета электронной структуры циклического полиена

Другой тип солитонов наблюдается в сопряженной системе (например, в транс-полиацетилене), которая характеризуется чередующимися двойными и одинарными связями. В соответствии с симметрией задачи понятно, что если переставить местами одинарные длинные и двойные короткие связи, то энергия системы не изменится. Сосуществуя в едином полимере, эти две различные конфигурации приводят к возможности возникновения дефекта электронной структуры, изображенного на рис. 9 пунктиром. Это и есть нейтральный солитон со спином  $1/2$ , который представляет собой просто электрон со свободной валентностью, если считать, что солитон локализован на одном атоме углерода, обозначенном на рис. 9 как  $C_0$ . Энергия этого солитона ниже энергии возбуждения бездефектного полимера (см. рис. 9, б), и она определяет энергию неподвижного солитона.

Если чистый сопряженный полимер легировать примесями  $p$ -типа, т. е. акцепторами электронов, то атом углерода  $C_0$  отдаст этот электрон, и в этом месте образуется положительно заряженный солитон со спином 0. Если же ввести примесь  $n$ -типа, т. е. донор электронов, то электрон с этой примеси, добавляясь на несвязывающую орбиталь атома углерода  $C_0$  (см. рис. 9, б) со спином, антипараллельным спину уже находящегося на этой орбитали электрона, образует отрицательно заряженный солитон, спин которого, так же, как и положительно заряженного солитона, равен 0. Конечно, наличие с самого начала нейтрального солитона не является необходимым условием для образования заряженных солитонов. Отметим также, что в действительности

солитон локализуется не на одном атоме углерода, а охватывает примерно 15 углеродных атомов, как это имеет место в транс-полиацетилене.

Солитонные механизмы все чаще используются для объяснения электронной проводимости органических полупроводников. Так, проводимость чистого транс-полиацетилена объясняется возникновением нейтрального солитона, проводимость легированного полиацетилена — заряженными солитонами; проводимость интересных квазиодномерных органических соединений солей тертоцианохинодемитана — существованием солитонов с зарядом  $Q = \pm e/2$  и спином  $S = 0$ .

Следует все же заметить, что несмотря на успехи, достигнутые в понимании солитонных механизмов передачи энергии возбуждения, электрона или протона, пути использования этих механизмов сегодня неясны. Основные проблемы, которые возникают на этом пути, — как возбудить солитон именно в начале молекулярной цепи и как использовать эту информацию после прохождения солитона цепи.

Традиционный метод возбуждения молекулярной системы — поглощение света — не может возбудить солитон в заданной точке цепи, в связи с правилами отбора, а также поскольку поток света, который из-за дифракционных ограничений нельзя сфокусировать до молекулярных размеров, взаимодействует с равной вероятностью со всеми одинаковыми молекулами цепи. Как возможный выход из положения было предложено возбуждать солитоны за счет химических реакций специально выбранных концевых групп цепи. Тем не менее экспериментальные подтверждения существования какого-либо механизма локального возбуждения солитона до сих пор не известны.

Говоря об использовании молекулярных систем для преобразования информации, нужно иметь в виду, что практически все предложения этого рода в значительной степени являются спекулятивными, поскольку в литературе обсуждаются лишь принципиальные возможности использования процессов на молекулярном уровне для создания элементной базы микроэлектронных устройств. Фактически первой работой этого типа была статья А. Авирама и М. Ратнера «Молекулярный выпрямитель».

В этой статье рассмотрена модельная молекула, со-



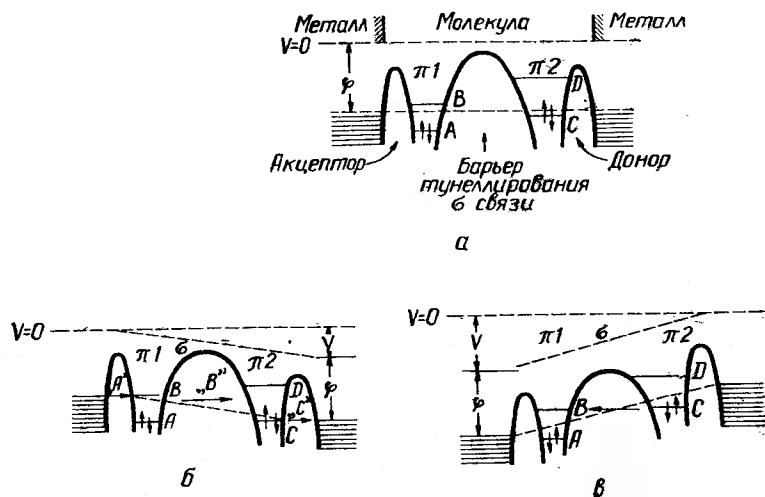


Рис. 10. Молекулярный выпрямитель между двумя металлическими электродами:

а — схематическое изображение энергии в зависимости от расстояния; А и С — высшие занятые уровни, В и D — уровни, на которые могут быть приняты электроны акцептора и донора соответственно,  $\phi$  — работа выхода металла,  $\pi_1$ ,  $\pi_2$  — потенциальные ямы, отвечающие  $\pi$ -связям акцептора и донора соответственно,  $\sigma$  — потенциальный барьер, образованный  $\sigma$ -связью; б — сдвиг уровней молекулярного выпрямителя при приложении прямого напряжения V; «А», «В» и «С» — три туннельных процесса, в — сдвиг уровней молекулярного выпрямителя при приложении обратного напряжения

стоящая из двух полимерных фрагментов, донора и акцептора электронов, соединенных системой метиленовых мостиков. При наличии разности потенциалов между противоположными концами этой молекулы электронные проводимости в направлениях донор—акцептор и обратном ему заметно различаются, а, следовательно, увеличивается вероятность перехода электрона в направлении электрод—акцептор—донор—электрод (рис. 10). Таким образом, рассматриваемая молекула должна работать как элемент, выпрямляющий электрический ток. При этом, естественно, следует помнить, что речь идет о прохождении единичного электрона, и поэтому говорить об электрическом токе можно, только имея в виду достаточно большой ансамбль подобных молекул.

Тем не менее представляются перспективными поиски молекулярных систем, в которых донор и акцептор электрона разделены промежуточной группировкой

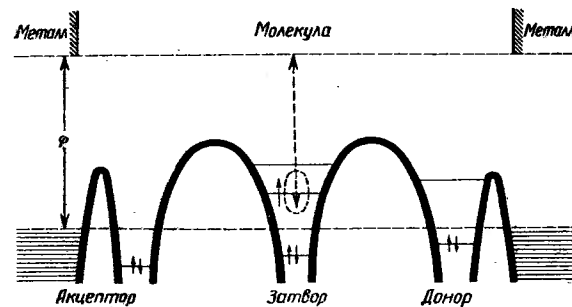


Рис. 11. Схема электронных уровней гипотетической молекулярной системы, работающей в режиме переключающего элемента

(затвором), электронные свойства которой можно менять каким-либо воздействием — приложением потенциала, электромагнитным излучением и т. п. Так, в изображенной на рис. 11 гипотетической системе оптическое возбуждение электрона с верхнего уровня молекулы-затвора (З) создает возможность для электрона пройти от акцептора (А) к донору (Д). Такая система должна вести себя как управляющий элемент.

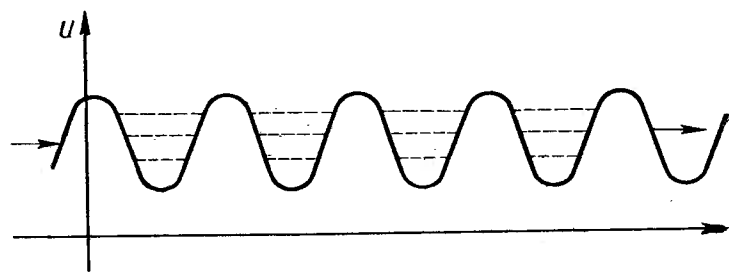
Более детальные предложения о возможностях построения молекулярной элементной базы были сформулированы Ф. Картером. Они сводятся к двум основным направлениям поиска:

- использование резонансного туннельного механизма электронной проводимости и управление им за счет сдвига уровней в одной из потенциальных ям (управляющие группировки);

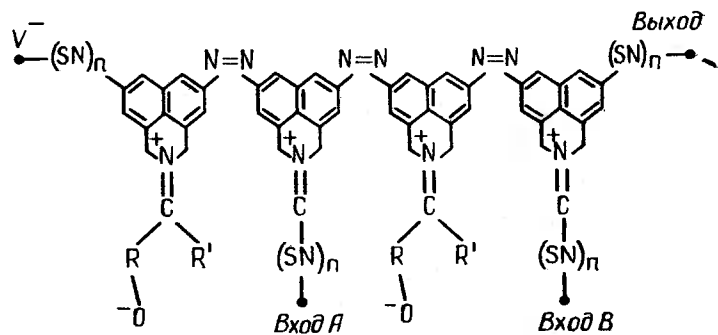
- использование солитонного механизма для изменения электронной структуры молекулярных систем с целью управления информационно-логическими процессами (переключающиеся молекулы).

Возможности управления резонансным туннельным механизмом можно проиллюстрировать примерами молекулярных элементов НЕ И и НЕ ИЛИ, предложенных Картером. Отметим, что одного из этих элементов достаточно, чтобы построить любую логическую схему.

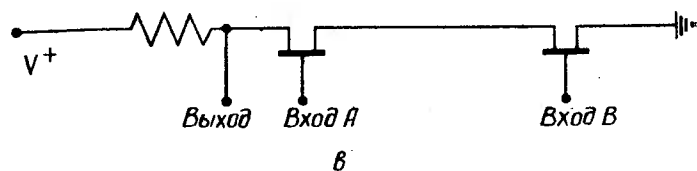
На рис. 12 показана структура молекулярного элемента НЕ И. В нем положительно заряженные ароматические гетероциклические группировки представляют



а



б

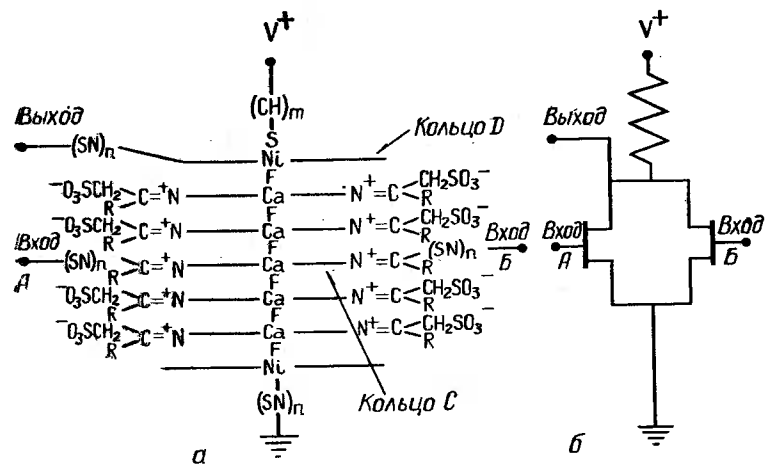


в

Рис. 12. Молекулярный элемент НЕ И:

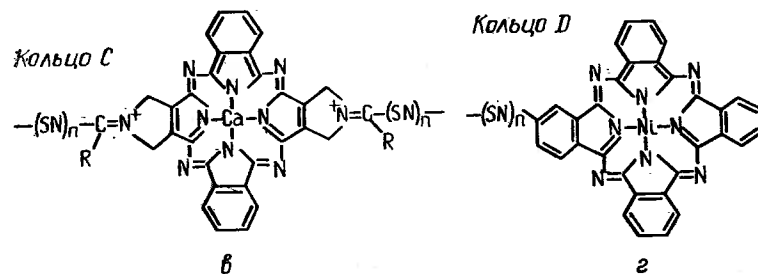
а — система потенциальных ям, отвечающих конденсированным гетероциклическим группировкам; б — структурная формула молекулярного элемента; в — принципиальная электрическая схема элемента НЕ И

собой потенциальные ямы для электрона, а связывающие их диазогруппировки — потенциальные барьеры. В этом элементе электроны свободно проходят вдоль цепи потенциальных ям, если его энергия совпадает с одним из уровней энергии ямы. В то же время, если на один из входов подать электрон, структура элемента перестроится: будет нейтрализован заряд ароматической



а

б



б

г

Рис. 13. Молекулярный элемент НЕ ИЛИ:

а — структурная схема молекулярного элемента; б — принципиальная электрическая схема элемента НЕ ИЛИ; в и г — структурные формулы кольца С и кольца D соответственно

группировки и, следовательно, существенно изменится форма потенциальной ямы и расположение в ней энергетических уровней. Это должно привести к резкому уменьшению коэффициента пропускания системы.

Молекулярный элемент типа НЕ ИЛИ, предложенный Картером и действующий на том же самом принципе, показан на рис. 13. Он представляет собой стопку молекул — производных фталоцианинов галлия и никеля, каждая из которых является потенциальной ямой для электрона, а барьеры между ямами создаются за счет мостиков из атомов фтора.

Как нетрудно видеть, оба эти примера в основе сво-

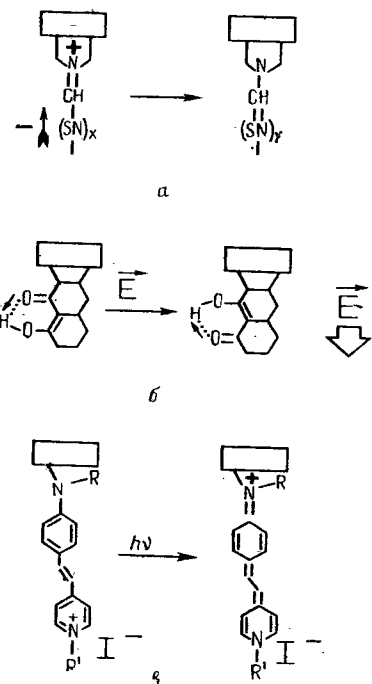


Рис. 14. Переключающиеся молекулярные группировки, управляемые: а — потоком электронов, б — электрическим полем; в — световым излучением

В основе развитого Картером второго подхода лежит солитонное переключение из одного состояния молекулы в другое, происходящее, например, в процессе фотопревращения (рис. 15). Такая группировка может быть фрагментом сопряженной полиеновой цепи. Тогда после прохождения солитона в основной цепи, т. е. замены всех двойных связей на одинарные и наоборот (см. рис. 15), фотобизомеризация происходить не будет, что может служить индикатором прохождения солитона. И наоборот, инициировав до прохождения солитона в основной цепи реакцию изомеризации, можно изменить структуру не только переключающегося фрагмента, но и прилегающего к нему участка цепи. Тогда по этому участку солитон пройти не сможет.

На аналогичных принципах можно построить и бо-

ей опираются на концепцию управляющих группировок, т. е. молекулярных фрагментов, электронная структура которых перестраивается под действием некоторого фактора (например, передачи электрона по цепи управления) и тем самым прерывает движение электрона в основной цепи. Картер рассматривал и другие типы воздействия на управляющие группировки, например, электрическое поле, которое должно сдвигать водородную связь в системах, определенным образом ориентированных молекул (рис. 14). Аналогичного эффекта можно добиться, используя фотоизомеризацию.

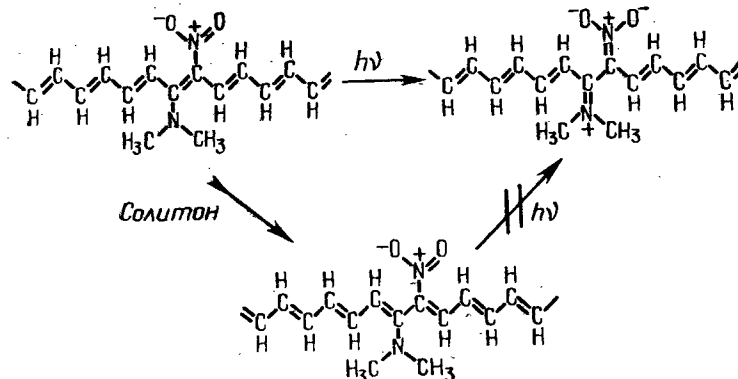


Рис. 15. Схема, иллюстрирующая принцип солитонного переключения молекулярного фрагмента, встроенного в полиеновую цепь

лее сложные переключающие системы с большим числом входов и выходов. На рис. 16 показана подобная система, построенная на базе электроно-проводящих цепей А, С, С, Д. Здесь так же, как и в случае, рассмотренном выше (элемент НЕ И), предлагается использовать резонансный туннельный переход электрона от акцептора А к донору Д. Солитонное переключение при этом может осуществляться по трем каналам — полиеновых цепей (горизонтальные направления на рис. 16). Варианты состояний системы показаны в табл. 2. Здесь единицами обозначены наличие двойной связи углерод=углерод между элементами системы, нулем — отсутствие ее. Нетрудно видеть, что электрон может пройти по одному из каналов (вертикально расположенной цепи на рис. 16) лишь в том случае, когда соответствующий столбец табл. 2 состоит из единиц. Изменение состояния системы после прохождения солитона записано в таблице как замена единицы на нуль.

Таблица 2

Состояния логической схемы с несколькими входами и выходами, управляемой за счет солитонного переключения

Канал	1	2	3	4
Цепочка 1	1	0	1	1
Цепочка 2	1	1	0	1
Цепочка 3	1	1	1	0

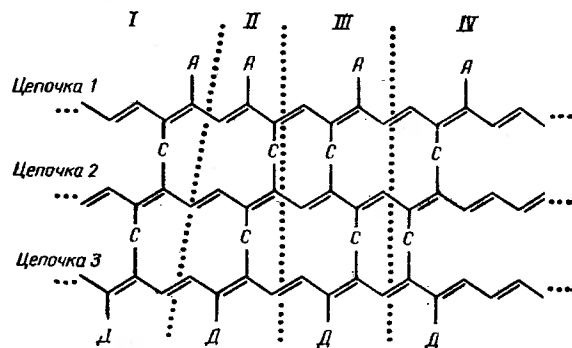


Рис. 16. Логическая схема с несколькими входами и выходами, управляемая за счет солитонного переключения:

А — акцептор электрона, Д — донор электрона, С — элемент проводящей цепи

Картер же предложил ряд других молекулярных элементов, включая элементы памяти, микролазеры для оптической передачи информации и т. д.

Следует также упомянуть и о возможности создания молекулярных оптических устройств переработки информации, простейшие из которых уже рассматривались выше в разделе, посвященном молекулярным устройствам хранения информации.

Одно из простейших устройств такого рода — динамический диапозитив — плоский тонкопленочный слой, содержащий молекулы, способные запоминать информацию. Запись и считывание информации осуществляются лазерными лучами с различающимися длинами волн. Такое устройство можно использовать для параллельной записи и считывания информации широким потоком излучения, при котором двумерные массивы и изображения записываются и считываются как целое. Если узкий лазерный луч последовательно записывает и считывает информацию, динамический диапозитив можно использовать как устройство памяти для обычной ЭВМ последовательного действия.

Динамический диапозитив можно использовать для синтеза изображений, когда запись осуществляется по точкам последовательно, а считывание — параллельно. Это дает возможность вводить информацию в оптиче-

скую машину параллельного действия или выводить ее из ЭВМ последовательного действия.

Применяя параллельную запись и последовательное считывание, можно осуществлять обратную операцию — развертку изображения для вывода информации из машин параллельного действия и ввода изображений в машину последовательного действия.

Используя три последовательно расположенных диапозитива, можно получить оптический процессор, выполняющий операцию свертки (пространственной фильтрации). В таком устройстве на первом диапозитиве синтезируется изображение, на втором — пространственный фильтр. В результате выполнения операции оптической свертки на выходном, третьем, диапозитиве возникает изображение. Операция свертки — основная при обработке двумерных информационных массивов. Она может быть использована как для их математической обработки, так и для распознавания образов и т. п.

### Аналоговые молекулярные устройства

Практически все предложения относительно возможности создания молекулярных аналоговых устройств переработки информации основаны на использовании больших белковых молекул и, в частности, ферментов.

Молекулярные системы такой сложности, как белки, ферменты и другие аналогичные им соединения, имеют достаточно много устойчивых состояний. Разнообразны и возможности управления переходами между этими состояниями — оптическое возбуждение, изменение кислотности (рН) среды, воздействие полей и т. д. Это дает основания надеяться, что на базе ферментов — по-видимому, функционально наиболее гибких белковых молекул — могут быть построены устройства переработки информации принципиально новой архитектуры.

Белковые молекулы легко кристаллизуются на подложках, образуя квазидвумерные системы, что не создает излишних технологических трудностей. К тому же биологические материалы этого типа дешевы и легко доступны, стоимость получения их в чистом виде постоянно снижается.

В последние годы был предложен ряд направлений

создания молекулярных аналоговых устройств для решения различных задач по обработке информации.

В частности, интересное направление разрабатывается в Институте биологической физики АН СССР под руководством члена-корреспондента АН СССР Г. Р. Ибанишвили. Они основаны на использовании молекулярных систем и их ансамблей, находящихся в стационарных, далеких от равновесия состояниях, которые могут существовать только за счет обмена энергией (и в общем случае массой) с окружающей средой. В таких системах возникают и распространяются автоволны, т. е. волны возбуждения в активных средах, сохраняющие свои характеристики постоянными за счет распределенного в среде источника энергии. Существенно при этом, что автоволновые процессы описываются математическим аппаратом, использующимся для анализа нелинейных задач, к которому сводится целый ряд практически важных проблем — образование кристаллических структур, кинетика химических процессов, биологический морфогенез, эволюция биологической популяции и т. д. При использовании этого аппарата в настоящее время приходится прибегать к настолько трудоемким численным решениям, что трудно надеяться на возможность решения реальных задач, встречающихся сегодня на практике, даже с учетом перспективы роста быстродействия современных цифровых ЭВМ.

В качестве физической реализации такого вычислительного устройства можно рассматривать квазидвумерные кристаллизованные пленки белков и ферментов, которые в определенных условиях ведут себя как активные среды с восстановлением. Элемент активной среды — молекула белка с линейными размерами 30—50 Å, которая может быть переведена в одно из нескольких устойчивых состояний. При этом участок пленки площадью 1 см<sup>2</sup> может содержать порядка 10<sup>12</sup> таких активных элементов. При движении по пленке плоской волны возбуждения и реально достижимой скорости распространения волны 0,1 мм/с в единицу времени будет происходить 10<sup>12</sup> переключений, что, по-видимому, достаточно для построения эффективного устройства.

Основой аналогового вычислительного устройства для исследования процессов, описываемых дифференциальными уравнениями параболического типа (процессы распространения тепла, горения, распространения

эпидемий, волн возбуждения в мозге и т. п.) может стать среда, содержащая различные молекулярные компоненты, между которыми возможны реакции типа Белоусова — Жаботинского. Подобные реакции представляют собой неравновесный химический процесс, проходящий одновременно с диффузией.

Автоволновые процессы в таких системах, так же, как в случае уже рассмотренной квазидвумерной структуры, построенной из белков и ферментов, могут привести к образованию так называемых диссипативных структур — чередующихся зон среды с различными характеристиками. В отдельных случаях эти зоны имеют различные оптические свойства. Тогда возникает возможность на основе реактора, в котором происходит автоволновой процесс, присоединенного к традиционной цифровой ЭВМ, снабженной сканирующим оптическим анализатором, создать высокопроизводительные гибридные аналого-цифровые вычислительные устройства.

Более специализированные аналоговые устройства для конкретных задач типа распознавания образов рассматривались М. Конрадом. В частности, он предполагал, что такие устройства с успехом могут использоваться в качестве «глаз» робота, вырабатывающих сигналы для управления его органами. Схема предложенного Конрадом устройства, трансформирующего оптическое изображение в распределение аналогового электрического сигнала, показана на рис. 17.

Телевизионная камера проецирует оптическое изображение на фоточувствительный слой, активируя молекулу или молекулярный ансамбль этого слоя. Далее это распределение должно «усиливаться» за счет каскада реакций, катализируемых ферментами, встроенными в последовательно расположенные синтетические мембраны. Число «ступеней усиления» надо подобрать так, чтобы локальные концентрации продуктов реакций в плоскости последнего слоя были достаточны для детектирования этих продуктов. В качестве детекторов предлагается использовать набор биосенсоров типа полевых транзисторов, избирательно реагирующих на один из продуктов реакции и расположенных в плоскости детектора. Таким образом, биофизическое преобразование и биохимическое усиление преобразуют оптическое изображение в распределение аналогового электрического

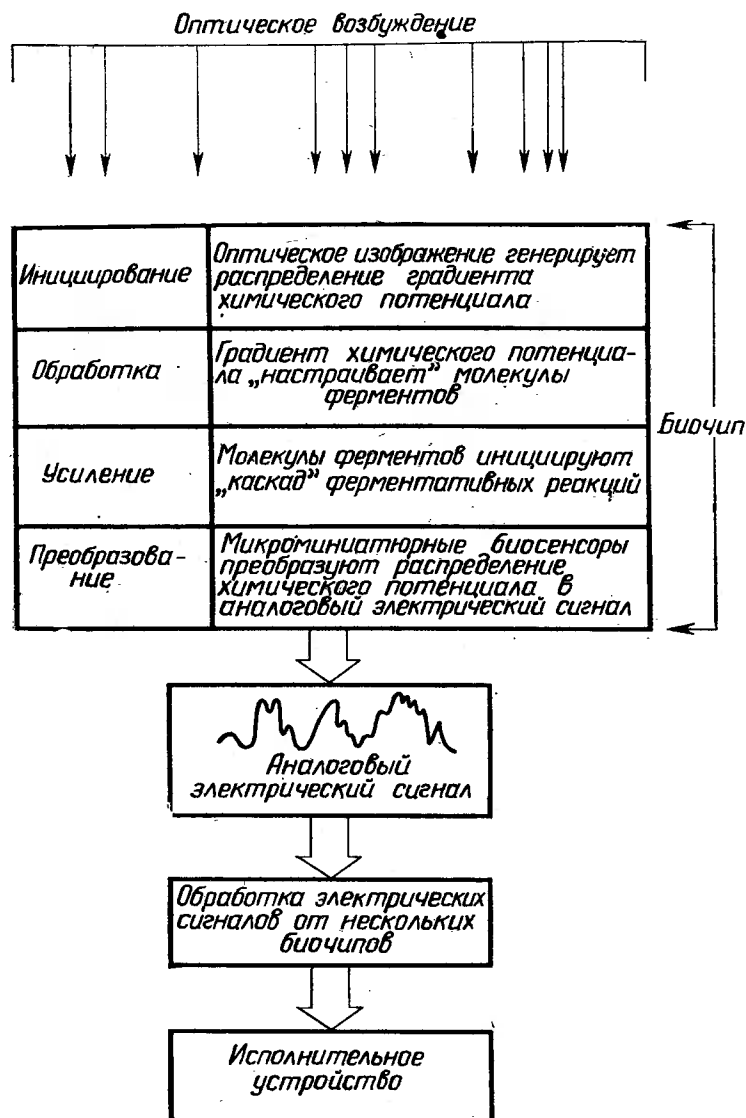


Рис. 17. Схема биоустройства, предназначенного для тонкого управления механизмом перемещения руки робота в системе «глаз—рука». Входное оптическое изображение от телевизионной камеры преобразуется в выходной аналоговый сигнал

сигнала в плоскости детектора, которое перерабатывается управляющим вычислительным устройством в исполнительные сигналы для движителей робота.

Естественно, что проекты построения устройств обработки информации на базе белковых молекул встречают целый ряд вопросов и критических замечаний со стороны биофизиков и биохимиков, работающих с белковыми объектами. Так, непонятно, как будут функционировать достаточно «нежные» молекулы белка в вычислительных устройствах, которые должны устойчиво работать в течение длительного времени, как будет восстанавливаться первоначальное состояние системы после однократного прохождения сигнала, будет ли молекулярное вычислительное устройство решать поставленные задачи достаточно быстро, чтобы успешно конкурировать с традиционными вычислительными машинами?

В связи с первым и, наверное, основным из поставленных вопросов хотелось бы рассказать и об идеях, выдвигаемых в связи с обсуждением проблем молекулярной микроэлектроники К. Ульмером, сотрудником компании «Дженекс». Эта компания специализируется на создании технологии производства различных сложных органических продуктов методами генной инженерии.

Действительно, отмечает Ульмер, белковые молекулы стабильны в узкой области физических условий — температуры, кислотности и т. д. Как правило, среднее время жизни ферментов в живом организме составляет несколько недель, после чего они заменяются новыми. И хотя стабильность природных ферментов можно существенно повысить, вживляя их в твердые матрицы, все же использование их в реальных устройствах переработки информации кажется нереальным.

Однако технология генной инженерии достигла сегодня такого уровня, что становится возможным серьезно думать о целенаправленном изменении свойств белковых молекул. Меняя последовательность оснований в ДНК, определяющей структуру синтезируемого клеткой белка, и создавая практически новые гены, можно в принципе добиться, чтобы вновь полученный белок имел, например, повышенную температурную устойчивость или стойкость к повышенной радиации.

Развивая эти идеи, другой американский ученый, М. Конрад, выдвигает предположение о том, что существуют, по-видимому, возможности создать белковые



молекулы, способные оптимально выполнять операции по переработке информации за счет процесса псевдоэволюции. Под этим он подразумевает создание большого числа несколько отличных друг от друга по структуре молекул белка и отбор тех из них, которые окажутся наиболее пригодными для решения поставленной задачи.

Однако и Ульмер, и Конрад отчетливо сознают, что практическое осуществление этих идей возможно только на базе теории, детально связывающей линейную последовательность аминокислот в молекуле белка с ее трехмерной структурой, а также с ее физическими, химическими и физиологическими свойствами. А именно эта теория находится в настоящее время в зачаточном состоянии. В связи с этим Ульмер достаточно объективно высказывается в одной из своих публикаций:

«Пройдет не менее пяти лет, пока мы узнаем хотя бы основные закономерности связи первичной последовательности аминокислот в белке с его пространственной структурой. И только после этого мы сможем сделать что-нибудь более или менее существенное в области биокomпьютеров».

## ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ПРИЕМЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ

Использование молекулярных агрегатов в качестве элементов микроэлектронных устройств неминуемо приводит к необходимости разработки методов объединения этих агрегатов в единое изделие. При этом специфика перспективных материалов молекулярной микроэлектроники и ожидаемая сверхвысокая степень интеграции, по-видимому, исключают использование традиционных приемов полупроводниковой планарной технологии.

В литературе довольно подробно обсуждаются детали технологии создания молекулярной ЭВМ в единой сборке с молекулярной памятью (рис. 18). Эта задача аналогична быстро развивающейся в настоящее время области синтеза линейных и разветвленных высокомолекулярных систем (полипептидов заданной структуры и т. п.). Поэтому естественно, что в качестве основного технологического приема в данном случае обратились к

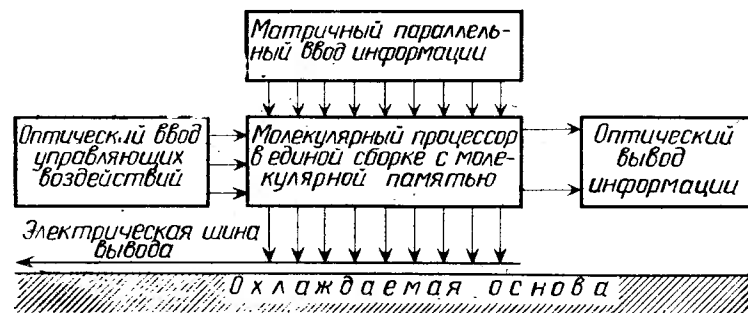


Рис. 18. Блок-схема молекулярной ЭВМ

уже упоминавшемуся синтезу Меррифилда с некоторыми дополнительными управляющими воздействиями.

Меррифилд для получения полипептидов с заданной последовательностью аминокислот предложил вариант твердофазного синтеза, когда полимерная цепь, растущая за счет реакции с очередным фрагментом, находящимся в жидкой фазе, все время химически связана с некоторым твердым полимером. В этом методе привлекательно то, что прикрепленные к полимеру промежуточные продукты и конечный продукт не переходят в раствор, а, следовательно, упрощается очистка и резко повышается выход конечного продукта. Существенно также и то, что этот процесс может быть автоматизирован.

Картер для создания молекулярной ЭВМ предложил технологическую схему, основанную на синтезе методом Меррифилда с некоторыми дополнительными приемами (рис. 19). В результате синтеза должна быть получена трехмерная высокомолекулярная система заданной структуры, химически связанная с поверхностью подложки. Дополнительно предлагалось использовать локальное лазерное стимулирование реакций, некоторые процессы планарной технологии (например, рентгеновскую и электронную литографию), электрохимические процессы.

Эта технология является делом более или менее отдаленного будущего, поскольку пока ни реальной молекулярной элементной базы, ни молекулярной схемотехники не существует. Но уже сегодня вырисовываются потребности в создании простых молекулярных

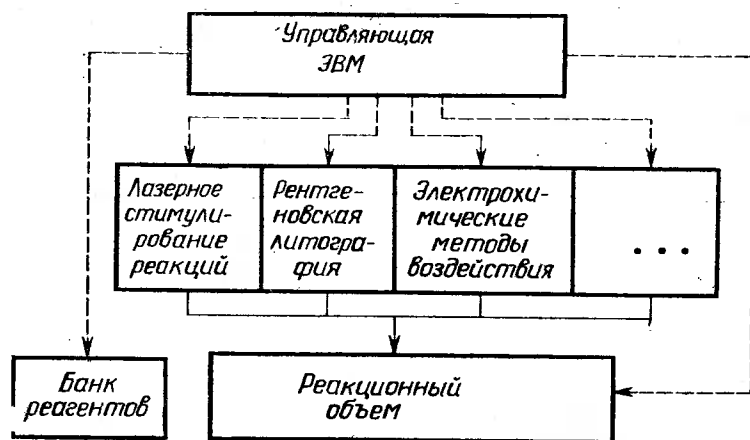


Рис. 19. Блок-схема технологического процесса синтеза молекулярной ЭВМ

устройств для изучения свойств молекулярных агрегатов и ряда практических приложений. Сейчас, как правило, для этого используются тонкопленочные структуры, полученные различными методами.

Один из них, разработанный Лэнгмюром и Блодже, состоит в принудительной сборке тонких пленок ориентированных молекул поверхностно активных органических веществ на границе раздела вода — воздух. Затем готовая пленка переносится на специально подготовленную поверхность твердого тела. Этим методом в настоящее время широко пользуются для создания мо- и мультимолекулярных слоев (последовательно применяя эту технику), на которых можно изучать электронную проводимость молекулярных систем, образующих пленку, процессы передачи энергии молекулярно-возбуждения и т. д.

С помощью этого метода изучался механизм электронной проводимости мономолекулярных пленок жирных кислот, заключенных между двумя алюминиевыми электродами. Экспоненциальный характер зависимости проводимости от числа атомов углеводородного остатка кислоты свидетельствует в пользу туннельного механизма проводимости (рис. 20, а, б).

Среди большого числа работ по изучению фотохими-

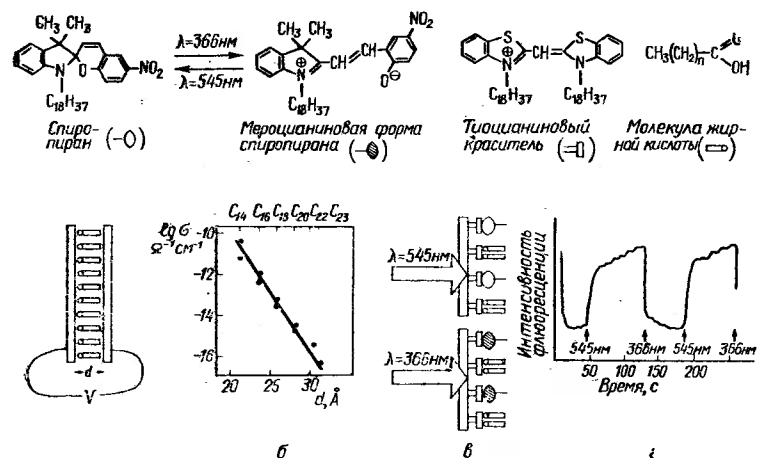


Рис. 20. Изучение процессов электронной проводимости и тушения флуоресценции в моно- и мультимолекулярных пленках Лэнгмюра—Блодже:

а — схема устройства для измерения электронной проводимости; б — зависимость проводимости от длины цепи (числа CH<sub>2</sub> групп) молекулы жирной кислоты; в — схема эксперимента по изучению тушения флуоресценции тиоцианинового красителя за счет передачи возбуждения мероцианиновой форме спиропирана, возникающей в результате фотопревращения ( $\lambda = 366$  нм); г — модуляция интенсивности флуоресценции красителя излучением различных длин волн по схеме (в)

ческих процессов в пленках Лэнгмюра—Блодже представляет интерес исследование флуоресценции тиоцианинового красителя в системе двух мономолекулярных слоев, наложенных друг на друга, один из которых содержал краситель в матрице, построенной из молекул жирной кислоты, а другой — спиропиран в аналогичной матрице (рис. 20, в, г). Краситель флуоресцирует при возбуждении излучением с длиной волны 405 нм. В то же время окрашенная форма спиропирана, возникающая в результате фотопревращения при возбуждении излучением с длиной волны 366 нм, имеет полосу поглощения, близкую полосе тиоцианинового красителя, и может тушить его флуоресценцию. Поэтому при непрерывном облучении (с длиной волны  $\lambda = 405$  нм) системы двух пленок Лэнгмюра—Блодже, одна из которых содержит тиоцианиновый краситель, а другая — спиропиран, периодическое включение дополнительного

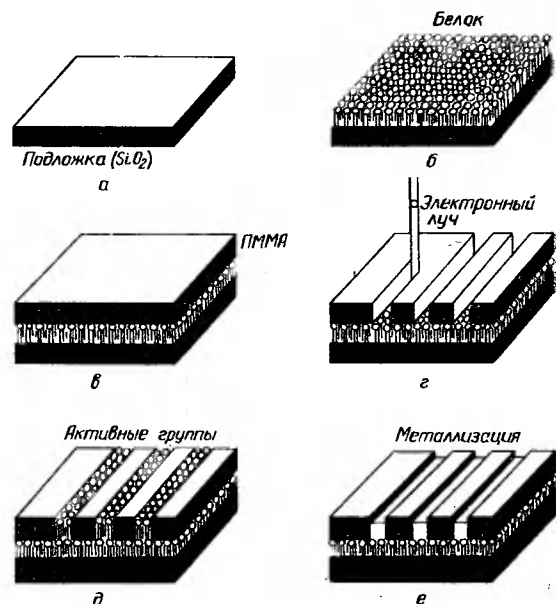


Рис. 21. Технология изготовления биочипа: а — подготовка подложки ( $\text{SiO}_2$ ); б — нанесение мономолекулярного слоя белка; в — нанесение изолирующего слоя полиметакрилата; г — электронно-лучевое литографирование; д — последующая достройка схемы или е — металлизация

излучения ( $\lambda = 366$  нм и  $\lambda = 545$  нм, переводящего окрашенную форму в исходную) модулирует интенсивность флуоресценции красителя. Изученная система может служить прообразом более сложных устройств, способных выполнять логические функции.

Вероятно, технику Лэнгмюра—Блодже можно использовать для создания простейших изделий микроэлектроники на базе органических материалов.

Пусть имеется поверхностно-активное вещество, молекулы которого обладают свойствами выпрямителя, как элемент Авирара—Ратнера. Из этих элементов можно создать мономолекулярный слой Лэнгмюра—Блодже. В этом случае, по-видимому, существует возможность изготовления диодной матрицы, когда на изоли-

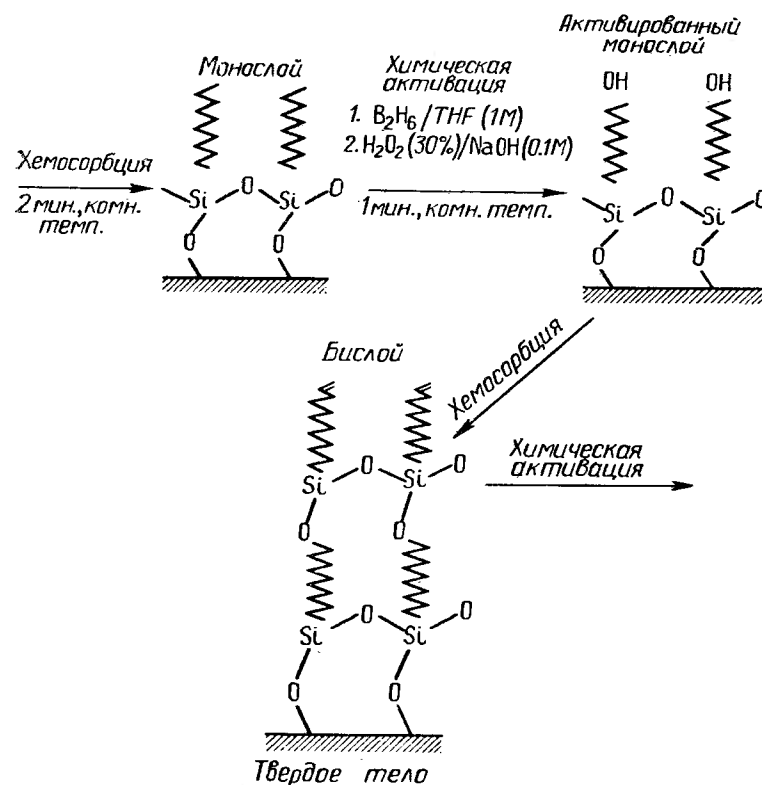


Рис. 22. Схема образования мультимолекулярных органических слоев на поверхности кремния

рующую подложку наносится система линейных электродов, на нее — мономолекулярный лэнгмюровский слой вещества, на котором далее создается вторая система линейных электродов, направление которых перпендикулярно направлению первых. Резкая анизотропия проводимости лэнгмюровской пленки приведет к тому, что проводящими окажутся только участки, находящиеся в перекрестии верхних и нижних электродов.

Более сложная технология может быть основана на том, что на подложку (рис. 21) окиси кремния наносит-

ся мономолекулярный слой белковых молекул, который закрывается пленкой фоторезиста. Используя электронно-лучевую литографию, на поверхность наносят необходимый рисунок. При этом экспонированный участок вымывается спиртом. Обнаженные участки схемы металлизуются или же в них наращивается химическими реакциями следующий слой молекулярной схемы (рис. 22).

Сразу же следует заметить, что подобная технология отличается от современной планарной полупроводниковой технологии лишь видом используемых материалов и поэтому не дает значительного увеличения степени микроминиатюризации.

В течение многих лет для получения на поверхности твердого тела слоев заданного состава применялись химические реакции. Недавно был предложен двухстадийный химический синтез для создания на поверхности твердого тела моно- и мономолекулярных слоев органических соединений, аналогичных пленкам Лэнгмюра—Блоджа.

Представим, что изготовлено устройство по переработке информации на молекулярном уровне. Сразу же возникает вопрос: как осуществить ввод и вывод информации, т. е. как, например, осуществить контакт между обычными металлическими проводниками и молекулярным устройством.

Картером рассматривалась возможность выращивания на металлических (платина) и неметаллических (кремний, поверхности цепочек типа  $(CH)_n$  или  $(SN)_n$  для использования их в качестве молекулярных проводников, связывающих поверхность с молекулярным устройством. Так, для приготовления цепочки  $(SN)_n$  используется недавно синтезированное соединение серы  $(CH_3)_3Si-N=S=N-Si(CH_3)_3$ , которое ковалентно связывается с поверхностным атомом кремния. Затем, последовательно добавляя  $SCl_2$  и вышеозначенное соединение серы, последовательными химическими реакциями наращивается цепочка  $(SN)_n$ .

Другой способ ввода и вывода информации в молекулярное устройство можно осуществить оптическим путем. Предположим, что имеется линейный массив одинаково ориентированных хромофоров, которые, будучи возбуждены, затем излучают свет в одном выделенном направлении (как диполи) наподобие лазера.

Наиболее естественно встраивать эти диполи в пленки Лэнгмюра—Блоджа. Встраивание элементов в такую пленку — видимо, вообще одна из наиболее разумных возможностей синтеза молекулярных устройств.

Второй альтернативой пленкам Лэнгмюра—Блоджа является предложение создавать организованные мономолекулярные слои за счет адсорбции органических молекул на твердых анизотропных поверхностях (стеклах, пленках поливинилового спирта и т. п.). Возможности этого метода довольно ограничены, поэтому он не получил большого распространения. Тем не менее этим методом были получены весьма специфические слои с контролируемой геометрией пор за счет адсорбции смеси (см. рис. 22) молекул.

Последний из рассмотренных технологических приемов интересен еще и тем, что здесь впервые рассматривается возникновение структуры в процессе адсорбции, т. е. самоорганизация отдельных молекулярных компонентов в некоторую надмолекулярную систему, пусть даже и простейшую по своей структуре.

Идея самоорганизации отдельных молекулярных компонентов непосредственно в микроустройстве с некоторыми заданными функциями обработки информации становится все более популярной в последние годы. Во многом она базируется на большом экспериментальном материале о строении и свойствах биологических мембран и микрофаз поверхностно-активных веществ, а также на теоретическом рассмотрении этих объектов.

Так, известно, что различные поверхностно-активные вещества и, в частности, фосфолипиды, входящие в состав различных биологических систем, образуют в водных растворах (нередко с органическими и неорганическими добавками) микроагрегаты — сферические, симметричные мицеллы (глобулы), цилиндрические мицеллы, ламеллярные (слоистые) структуры, в том числе бислойные мембраны и сферические пузырьки (везикулы).

При уменьшении содержания воды эти микроагрегаты упаковываются в различные по своей структуре жидкокристаллические мезофазы и квазитвердые системы.

В последнее время были сделаны попытки оценить теоретически, какие факторы определяют структуру образующейся системы. В одной из работ обсуждались физические принципы организации мембран и других

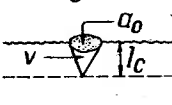

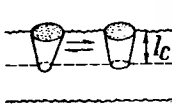
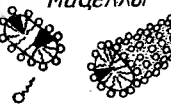
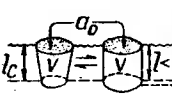
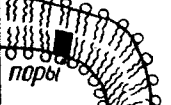

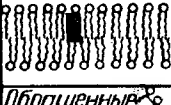
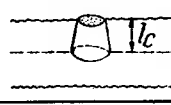

Липид	Критический параметр упаковки	Форма критической упаковки	Образующая структура
Одноцепочечные липиды (детергент) с большой площадью головной группы: некоторые лизофосфолипиды	$< \frac{1}{3}$	Конус 	Сферические мицеллы 
Одноцепочечные липиды с малой площадью головной группы: нейонные липиды, лизолецитин	$\frac{1}{3} - \frac{1}{2}$	Усеченный конус или клин 	Глобулярные или цилиндрические мицеллы 
Двухцепочечные липиды с большой площадью головной группы, жидкие цепочки: лецитин, спингомиелин, фосфатидилглицерол, фосфатидилинозитол. Некоторые одноцепочечные липиды с очень малой (незаряженной) головной группой	$\frac{1}{2} - 1$	Усеченный конус 	Гибкий бислой 
Двухцепочечные липиды с малой головной группой, анионные фосфатидилэтаноламин, фосфатидилсерин + $Ca^{2+}$	$\sim 1$	Цилиндр 	Плоский бислой 
Двухцепочечные липиды с малой площадью головной группы, нейонные липиды, ненасыщенный фосфатидилэтаноламин. Кардиолипин + $Ca^{2+}$ , фосфорная кислота + $Ca^{2+}$ , моносахаридглицериды, холестерол	$< 1$	Обращенный усеченный конус 	Обращенные мицеллы 

Рис. 23. Связь структуры микрофазы поверхностно-активного вещества с его молекулярным параметром упаковки

микрообъектов, прежде всего термодинамика процессов образования и связь структуры микрофазы со структурными свойствами молекулярной единицы, входящей в микрофазу. В частности, отмечено, что в термодинамически равновесных условиях величина параметра упа-

ковки  $V(a_0 l_c)^{-1}$  коррелирует с типом образовавшейся структуры (рис. 23). Здесь  $V$  — объем гидрофобного «хвоста» поверхностно-активной молекулы,  $a_0$  — площадь поверхности, приходящаяся на гидрофильную группировку,  $l_c$  — критическая длина углеводородной цепи, т. е. максимальная длина цепи, которая может быть приписана углеводородному остатку.

Естественно, что процессы образования рассматриваемых микрофаз слишком сложны для того, чтобы сегодня говорить о возможности целенаправленного конструирования практически используемых устройств. Тем не менее известны попытки применить микроагенты поверхностно-активных молекул для решения практически важных задач. Так, было показано, что при использовании мицеллярных систем и мембран существенно улучшаются характеристики окислительно-восстановительных реакций в процессах искусственного преобразования солнечной энергии.

Все обсуждавшиеся в этом разделе проблемы относятся к термодинамически стационарным системам, близким к положению равновесия. Однако существует и другая весьма важная область проявления процессов самоорганизации, характерная, в частности, для сложных биологических объектов — область сильно неравновесных систем. Не останавливаясь подробно на особенностях описания таких систем, — направлении, активно развиваемом в настоящее время на основе результатов работ школы Пригожина, — отметим лишь, что для сложных биологических систем характерны три основных свойства.

Во-первых, биологические объекты являются открытыми системами, т. е. они функционируют в условиях непрерывного обмена энергией и веществом с окружающей средой; во-вторых, биологические системы находятся в стационарных состояниях, далеких от состояния термодинамического равновесия, и в силу этого (в третьих) биологические объекты существенно неоднородны.

Эти свойства необходимо принимать во внимание при обсуждении возможностей имитации биосистем для создания устройств хранения и переработки информации. В то же время не исключено, что дальнейшее развитие теории неравновесных систем позволит в будущем использовать такие системы для этих целей.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ. НАДЕЖДЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ

В марте 1981 г. под эгидой Военно-морской исследовательской лаборатории США и Управления исследовательских работ ВМФ США состоялось рабочее совещание по молекулярным электронным устройствам. В конце этого совещания выступил заместитель директора лаборатории А. Берман, ответственный за выбор и финансирование новых направлений исследований.

«В области молекулярных устройств, — сказал он, — которая, я думаю, неизбежно будет победителем в соревновании за скорость вычисления  $10^{12}$  операций в секунду, многое еще нужно сделать. В последующие десятилетия необходимы весьма крупные инвестиции в эту область. Большая часть из них должна пойти на генерацию новых идей. Я думаю, что сегодня мы мыслим в достаточной степени ограниченно. При построении вычислительных машин на молекулярной основе возникают все те же проблемы, которые нужно решать при создании обычных компьютеров. А именно — как вводить данные, как определить, что состояние ячейки изменено, как данные будут храниться, выводиться, направляться по различным адресам, как организовать буферную память и другие. Это потребует значительного использования наших знаний по основам физики, химии и архитектуры вычислительных машин».

Каково же сегодня положение в области молекулярной микроэлектроники, если стоять на позиции разумного скептицизма?

Мы рассказали о молекулярной структуре и свойствах больших органических и элементоорганических соединений, которые дают основания надеяться, что существует реальная возможность создания микро- и оптоэлектронных устройств с использованием молекулярных элементов. Тем не менее приходится констатировать и то, что предложения о конкретных путях разработки молекулярных микроэлектронных изделий в достаточной степени неопределенны и во многом основаны на современных физических представлениях о молекулярной структуре больших органических и биологических молекул, которые, как мы видели, говорят, скорее, о принципиальных основах, а не о реальных путях построения конкретных устройств. Более того, предложения, которые выдвигаются различными учеными;

инициаторами работ в области молекулярной микроэлектроники, слабо связаны друг с другом и, в сущности, каждое из них представляет собой как бы зародыш большого направления исследований в области молекулярной элементной базы.

Что же нужно, чтобы развиваемые идеи сделались реальностью?

По-видимому, сегодня одна из основных ключевых проблем, определяющих успех, — разработка молекулярной схемотехники. Это означает, что и для цифровой молекулярной и для аналоговой схем нужно иметь реально существующий и детально изученный набор элементарных «кирпичиков» — молекулярных фрагментов, осуществляющих функции проводников, резисторов, емкостей, транзисторов и т. д. Нужно знать, в какой последовательности должны быть объединены между собой эти элементы, чтобы их сочетание выполнило ту или иную логическую функцию.

Для того чтобы решить эту задачу, необходима совместная работа физиков и химиков, специалистов в области молекулярной структуры и разработчиков электронных вычислительных устройств. Ведь заранее можно предсказать, что богатые логические возможности больших молекулярных систем, по-видимому, могут серьезно изменить современную «транзисторную» схемотехнику. В то же время понимание общих принципов создания устройств переработки информации может послужить толчком к «конструированию», синтезу и детальному изучению молекулярных систем такого типа, на которые сегодня специалисты по структуре и синтезу молекул не обращают внимания.

Более того, в процессе создания молекулярной схемотехники, вероятно, можно будет выявить круг задач переработки информации, в котором молекулярные устройства будут иметь принципиальные преимущества перед современной и перспективной полупроводниковой микроэлектроникой.

Если такая программа будет проведена в жизнь, то окажется возможным создать проект (структурную формулу) хотя бы простейшего молекулярного микроэлектронного элемента и реально оценить, насколько велики трудности его синтеза. Заранее можно сказать лишь, что даже простейшие элементы должны представлять собой очень большие, сложные, причудливо разветвлен-

ные системы молекулярных цепей, построенных из разнородных атомных группировок. Трудности синтеза таких молекулярных систем могут оказаться сравнимыми с трудностями, возникающими при синтезе природных соединений типа сложных белков и т. д.

Это стимулирует и поставит на реальную основу поиски других технологических приемов и, в частности, широко обсуждающейся возможности построения молекулярных электронных устройств за счет самоорганизации, т. е. самопроизвольного объединения фрагментов в единое устройство. В свою очередь идея самоорганизации должна наложить дополнительные условия на структурные особенности элементарных молекулярных фрагментов, поскольку потенциальная возможность самопроизвольного объединения фрагментов в более сложный агрегат должна быть заложена в структуре фрагмента.

Естественно, основная проблема — создание молекулярной схмотехники — может развиваться только на базе детального изучения молекулярной структуры.

Так, например, крайне важно знать совокупность электронно-конформационных состояний в ориентированных молекулах простейших белков и ферментов и, главное, возможность управляемых переходов между ними под действием селективного оптического возбуждения, электрических и магнитных полей и т. д. Не менее заманчиво теоретически предсказать и изучить экспериментально способы локального возбуждения солитона в протяженной одномерной или двумерной молекулярной системе и как его зарегистрировать после прохождения вдоль системы.

Ограничимся этими двумя большими физическими проблемами и не будем перечислять ряд других, актуальных в настоящее время задач, поскольку приближение к реально действующему молекулярному электронному устройству несомненно потребует решения целого ряда других проблем, в том числе и находящихся сегодня вне поля зрения исследователей. Их разработка поможет объяснить совокупность достаточно разрозненных фактов, известных в настоящее время из исследований в других областях физики, химии и биологии, очертить и связать подходы к практическому конструированию молекулярных устройств.

Если же говорить об использовании органических

материалов в рамках более или менее традиционных схмотехнических и технологических приемов, то преимущества использования этих материалов пока остаются так до конца и не понятыми. По-видимому, необходимо создание реально действующих, пусть даже простейших устройств типа диодной матрицы, что позволило бы на практике почувствовать специфику ансамблей органических молекул в качестве элементов электронной техники.

Что же можно сказать в заключение?

Уже сегодня молекулярная микроэлектроника представляет собой весьма специфическую, быстро развивающуюся область исследований. Темпы ее развития предсказать сегодня трудно. К тому же они будут зависеть от целого ряда объективных и субъективных факторов. Тем не менее работающие в этой области ученые считают, что первые молекулярные электронные устройства появятся в девяностые годы. Но независимо от времени их появления несомненно, что в случае успешного развития молекулярная микроэлектроника будет представлять следующий принципиальный шаг в области микроминиатюризации и совершенствования электронных устройств переработки информации.

## ЛИТЕРАТУРА

- Овчинников А. А. Электроника органических материалов. — Вестник АН СССР, 1983, № 1. с. 71.  
Давыдов А. С. Биология и квантовая механика. Киев, Наукова думка, 1979.  
Губанков В. Н. Солитоны. М., Знание, 1983.  
Кринский В. И., Михайлов А. С. Автоволны. М., Знание, 1984.  
Иваницкий Г. Р. Биологические микроустройства. — Вестник АН СССР, 1984, № 3, с. 118.  
Давыдов А. С. Солитоны в молекулярных системах. Киев, Наукова думка, 1984.



## СОДЕРЖАНИЕ

Введение. Как и на какой основе возникла молекулярная микроэлектроника . . . . .	4
Основные принципы создания молекулярных устройств хранения и переработки информации . . . . .	12
Цифровые молекулярные устройства . . . . .	19
Аналоговые молекулярные устройства . . . . .	45
Технологические приемы молекулярной микроэлектроники . . . . .	50
Заключение. Надежды и перспективы . . . . .	60
Литература . . . . .	63

**Николай Георгиевич РАМБИДИ,**  
**Вадим Монсеевич ЗАМАЛИН**  
**МОЛЕКУЛЯРНАЯ МИКРОЭЛЕКТРОНИКА:**  
**ИСТОКИ И НАДЕЖДЫ**

Гл. отраслевой редактор **Л. А. Ерлыкин**  
Редактор **К. А. Кутузова**  
Мл. редактор **Н. А. Сергеева**  
Обложка художника **Г. Ш. Басырова**  
Худож. редактор **М. А. Гусева**  
Техн. редактор **С. А. Птицына**  
Корректор **Л. В. Иванова**

ИБ № 7642

Сдано в набор 30.07.85. Подписано к печати 04.10.85. Т 14466. Формат бумаги 84×108<sup>1/32</sup>. Бумага тип. № 3. Гарнитура литературная. Печать высокая. Усл. печ. л. 3,36. Усл. кр.-отг. 3,68. Уч.-изд. л. 3,47. Тираж 34 110 экз. Заказ 1637. Цена 11 коп. Издательство «Знание». 101835, ГСП, Москва, Центр, проезд Серова, д. 4. Индекс заказа 854011.  
Типография Всесоюзного общества «Знание». Москва, Центр, Новая пл., д. 3/4.  
Отсканировано специально для сайта [www.infanata.org](http://www.infanata.org)