

FIȘA

raportului de activitate în anul 2020 pentru membrii titulari,
membrii corespondenți și membri desemnați ai Secțiilor de Științe ale AȘM

I. Titlul, numele și prenumele, secția de științe a AȘM

M. c. Țucherblat Boris, **Secția de Științe Exacte și Inginerești**

II. Activitate științifică (participarea în proiecte de cercetare)

--

III. Activitatea în anul de referință (date statistice)

Monografii	1
Articole în reviste cu factor de impact cu indicarea IF	6

IV. Rezultate științifice obținute în anul de referință (100-200 de cuvinte)

S-a arătat că proprietățile clusterilor magnetici nanoscopici cu structuri complexe pot fi explicate în baza abordării aspectelor de simetrie. S-a demonstrat că schimbul dublu în tetrameri cu geometrie plană pătrată, care conține doi electroni în exces, delocalizați pe patru nuclee de spin, poate cauza alinierea antiferomagnetică a spinilor. Au fost descrise aspectele fizice și cele legate de știința materialelor la scară nanometrică ale domeniului automatelor celulare cuantice moleculare (QCA). Au fost elucidate avantajele QCA în comparație cu schemele convenționale de calcul cuantic, în care informația binară este păstrată în vectorii proprii ai sistemului cuantic cu două nivele, aplicațiile practice ale cărora sunt limitate de cerințele de coerență. S-a arătat că sistemele QCA moleculare permit unități de scară nanometrică cu densități ultra-înalte ale dispozitivelor, precum și operare la temperatura camerei cu degajare extrem de joasă de căldură. Materialele moleculare asigură totodată opțiuni de dirijare ale proprietăților cheie ale moleculelor active prin mijloace chimice. Au fost formulate bazele teoretice ale problemelor electronice și vibronice ale celulelor QCA reprezentate prin complecși tetramerici cu valență mixtă (MV) și molecule organice, propuse pentru implementarea QCA moleculare cu patru site-uri (celule moleculare cu geometrie plană pătrată). Au fost prezentate conceptele cheie ale polarizării celulare și ale funcției de răspuns celulă-celulă, precum și principiile de design dirijat ale celulelor și grilelor QCA. S-a propus de a extinde considerabil clasa sistemelor potrivite în calitate de celule pentru QCA prin includerea punctelor cuantice magnetice și a dimerilor moleculari cu valență mixtă, care dau dovadă de schimb dublu. S-a propus de a utiliza în calitate de purtători de informație nu doar sarcinile, dar și gradele de libertate ale spinilor, ceea ce deschide noi perspective pentru design-ul dispozitivelor multifuncționale, care combină funcționalitățile QCA cu funcțiile de comutare de spin.

Lista lucrărilor publicate în anul de referință (conform Anexei 2)

Monografii

A. Palii, B. Tsukerblat. Targeting exchange interactions in nanosize molecular magnets by angular momentum technique. Elsevier, 2020.

Articole în reviste cu factor de impact WoS/ SCOPUS

1. Andrew Palii, Juan Modesto Clemente-Juan, Andrey Rybakov, Sergey Aldoshin, Boris Tsukerblat. Exploration of the double exchange in quantum cellular automata: proposal for a new class of cells. *Chem. Commun.*, 2020,56, 10682-10685. (I.F. 5.996).
2. Boris Tsukerblat , Andrew Palii , Juan Modesto Clemente-Juan, and Eugenio Coronado. Modelling the properties of magnetic clusters with complex structures: how symmetry can help us. *INTERNATIONAL REVIEWS IN PHYSICAL CHEMISTRY* 2020, VOL. 39, NO. 2, 217–265. (I.F. 4.500).
3. Andrew Palii, Juan Modesto Clemente-Juan, Sergey Aldoshin, Denis Korchagin, Andrey Rybakov, Shmuel Zilberg, and Boris Tsukerblat. Mixed-Valence Magnetic Molecular Cell for Quantum Cellular Automata: Prospects of Designing Multifunctional Devices through Exploration of Double Exchange. *J. Phys. Chem. C* 2020, 124, 46, 25602–25614. (I.F. 4.189).
4. Andrew Palii, Sergey Aldoshin, Shmuel Zilberg, Boris Tsukerblat. Parametric two-mode vibronic model of a dimeric mixed valence cell for molecular quantum cellular automata and computational ab-initio verification. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2020,22, 25982-25999. (I.F. 3.430).
5. Boris Tsukerblat, Andrew Palii, and Sergey Aldoshin V.V.Gudkov, Molecule Based Materials for Quantum Cellular Automata: a Short Overview and Challenging Problems (Review). *Isr. J. Chem.* 2020, 60, 1 –18. (I.F. 2.320).
6. Andrew Palii, Juan M. Clemente-Juan, Sergey Aldoshin, Denis Korchagin, Evgenii Golosov, Shmuel Zilberg and Boris Tsukerblat. Can the Double Exchange Cause Antiferromagnetic Spin Alignment? *Magnetochemistry* 2020, 6, 36. (I.F. 1.947).

Data completării fișei

Semnătura _____

