

Spowolnienie rozwoju technologii informatycznych zrodziło potrzebę poszukiwania alternatywnych sposobów przechowywania i obróbki danych. Obecnie pojawiło się wielkie wyzwanie dla nauk stosowanych – opracowanie nowych urządzeń elektronicznych pracujących w skali molekularnej, które będą alternatywą dla technologii półprzewodnikowej. Spintronika molekularna wychodzi na przód temu wyzwaniu oferując wielofunkcyjne czynniki o dużym potencjale aplikacyjnym, zmniejszając rozmiar urządzeń do nanoskali. Powyższy projekt wpisuje się w trendy w projektowaniu nowych technologii, wykorzystując w tym celu spintronikę molekularną.

Spintronika korzysta z własności kwantowej elektronów zwanej spinem. Spin elektronu można porównać do obrotu planety lub bicia wokół własnej osi. Elektron może się obracać w kierunku ruchu wskazówek zegara lub w przeciwną stronę, co można zilustrować jako kierunek spinu, odpowiednio "w górę" lub "w dół". Spin nadaje elektronom ich własności magnetyczne, wpływając na ich zachowanie w polu magnetycznym. Różne kierunki spinu elektronu można wykorzystać do zapisu informacji, używając kodu binarnego powszechnie stosowanego w komunikacji cyfrowej. Ułożenie spinu "w dół" będzie oznaczało "0", a "w górę" – "1". Spintronika otwiera więc perspektywę na stworzenie nowej generacji urządzeń, które będą połączeniem tradycyjnej mikroelektroniki z efektami zależnymi od spinu. W ten sposób można będzie pokonać ograniczenia dzisiejszej elektroniki takie jak niska prędkość przesyłu danych czy duże zużycie energii. Głównym wyzwaniem zarówno dla projektu jak i spintroniki jest efektywna kontrola spinu elektronu, zakładająca przełamanie spinu "w górę" i "w dół" w razie potrzeby oraz zachowanie kierunku spinu w pożądanym kierunku.

Ważną zaletą wielofunkcyjnych urządzeń molekularnych jest również ich zastosowanie w przemyśle. Rozwój wysokiej jakości materiałów magnetycznych wpływa na poprawę sprawności pojazdów elektrycznych, silników przemysłowych i generatorów wiatrowych. Co więcej, wykorzystanie zaawansowanych nanoskalnych czujników i czujników magnetycznych prowadzi do znacznej oszczędności energii elektrycznej, m.in. przy przechowywaniu danych w chmurze. Ponadto miniaturyzacja do skali nanometrycznej ma pozytywny wpływ na środowisko, zmniejszając liczbę generowanych odpadów oraz emisję gazów cieplarnianych.

Celem niniejszego projektu jest zaproponowanie, korzystając z metod chemii obliczeniowej, nowych wielofunkcyjnych urządzeń molekularnych charakteryzujących się odwracalnym przełamaniem (z "0" na "1" oraz z "1" na "0") pod wpływem światła lub potencjału elektrycznego. Urządzenia te zbudowane są z pojedynczych czynników w schemacie blokowym. Powstała z nich super-molekuła gromadzi własności każdej jednostki podstawowej zapewniając w ten sposób pożądaną funkcjonalność. Tak opracowane związki mogą znaleźć zastosowanie jako urządzenia do przetwarzania danych (np. druty molekularne, tranzystory, obwody), urządzenia do przechowywania informacji (czynniki molekularne) w komputerach kwantowych lub maszyny molekularne. Poza zastosowaniami w spintronice molekularnej systemy docelowe można będzie potencjalnie wykorzystać w detekcji czy biotechnologii (np. obrazowanie wysokiej rozdzielczości). Ponadto, określenie mechanizmów pracy wielofunkcyjnych urządzeń molekularnych i zaproponowanie obiecujących kandydatów na to stanowisko pozwoli nam prowadzić eksperymentatorów w ich syntezie, aby w przyszłości móc prowadzić produkcję takich urządzeń na skalę masową.