

Streszczenie popularno-naukowe

Długoterminowym celem wniosku jest poszukiwanie nowych perspektyw dla przetwarzania (zapisywania, przechowywania i odczytu) danych oraz zastosowania technologii kwantowych to celów obliczeniowych. Ponieważ ilość potencjalnych danych do przetworzenia nieustannie wzrasta, optymalnym podejściem do osiągnięcia powyższych celów może okazać się miniaturyzacja. Można to osiągnąć wykorzystując cząsteczki chemiczne, jak również nawet pojedyncze atomy. Obecnie, biorąc pod uwagę przetwarzanie danych z wykorzystaniem nośników momentu magnetycznego oraz chromoforów lub luminoforów optycznych, pionierskie prace prowadzone są na dwóch ścieżkach: (i) badanie zachowania dosłownie kilku wybranych poznanych cząsteczek zintegrowanych z odpowiednimi powierzchniami, lub (ii) projektowanie osadzenia i agregacji cząsteczek w dedykowanej matrycy krystalicznej. Chociaż uzyskane do tej pory wyniki są bardzo obiecujące, nadal napotyka się wiele przeszkód, co stwarza ciągłą potrzebę opracowania nowych strategii syntetycznych w kierunku materiałów leżących u podstaw funkcjonalności. Jednym z głównych problemów jest niska przewidywalność lokalnych oddziaływań cząsteczka-powierzchnia lub cząsteczka-cząsteczka. Jest to problem indywidualnej natury, przez co wymaga osobnego rozpoznania w każdym z rozważanych przypadków.

W związku z powyższym, niniejszy wniosek i propozycja badań koncentrują się na poszukiwaniu nowych wieloskładnikowych układów molekularnych, które mogłyby być w przyszłości odpowiednimi platformami do wdrożenia funkcjonalności opartej na właściwościach przełączalnych, obejmujących przeniesienie ładunku (CT) i przeniesienie elektronów (ET), elastyczność strukturalną i spinową, oraz właściwości magnetyczne i właściwości optyczne. Koncepcje wieloskładnikowych układów molekularnych uwiarygodniły się szczególnie mocno w ostatnim dziesięcioleciu, w związku z powszechnym stosowaniem *podejścia bloków budulcowych* (konstrukcyjnych) i *tektoniki molekularnej*, w poszukiwaniu *wielofunkcyjnych magnesów molekularnych* oraz *luminescencyjnych materiałów molekularnych*. Przechodząc do szczegółów, niniejszy wniosek ma na celu rozpoznawanie i wykorzystywanie łatwych do przewidzenia układów molekularnych o strukturze blokowej. W szczególności, grupa projektowa skupi się na stosownych wieloskładnikowych architekturach koordynacyjnych i supramolekularnych, oferujących możliwość zbadania i porównania właściwości wynikających różnych konfiguracji składników w obrębie tej samej platformy. Weźmie ona również pod uwagę komponenty chemiczne o specyficznym rozkładzie gęstości elektronicznej, istotnym dla właściwego kształtowania wymaganej struktury i właściwości. Badania obejmą (i) organiczno-nieorganiczne ko-kryształy hybrydowe, (ii) krystaliczne kompozyty rdzeń-powłoka oraz (iii) wielordzeniowe i wielometaliczne architektury koordynacyjne, oparte na specjalnie dobranych składnikach molekularnych. Oczekuje się, że proponowane badania przybliżą nas do opracowania złożonych schematów operacyjnych i zwiększenia przestrzeni operacyjnej do przetwarzania danych na poziomie molekularnym.