

## FIȘA

raportului de activitate în anul 2022 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)**

Articole în reviste cu factor de impact cu indicarea IF

6

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

A fost propus un prototip al celulei pentru automatele celulare cuantice moleculare (QCA) în baza clusterilor planari pătrați bi-electronici, punând în evidență rolul diferitor vibrații în forma funcției de răspuns celulă-celulă. A fost dezvoltat modelul vibronic multimodal pentru un cluster planar pătrat bi-electronic cu valență mixtă, care a fost aplicat pentru analiza fenomenului de localizare-delocalizare. Modelul include interacțiunea electronilor excesivi atât cu vibrațiile "respiratorii", cât și cu vibrațiile inter-centrale care modulează integralele de transfer electronic. S-a demonstrat că cuplarea cu două vibrații  $B_{1g}$  poate fi substituită cu cuplarea efectivă cu „modul de interacțiune”. În rezultat, problema complexă vibronică trimodală poate fi redusă la problema bi-modală, care include modul de interacțiune de simetria  $B_{1g}$  cu natură hibridă și vibrația pur inter-centrală  $A_{1g}$ . Analiza minimelor potențialului de suprafață adiabatic inferior a arătat că cele două vibrații produc efecte competitive asupra proprietăților de localizare-delocalizare. Prin urmare s-a constatat că cuplarea predominantă cu vibrația  $B_{1g}$  formează potențialul de suprafață adiabatic cu două minime, perechile electronice în fiecare minimum fiind localizate predominant pe o diagonală a pătratului, iar cuplarea predominantă cu modul  $A_{1g}$  conduce la formarea unei suprafețe cu un singur minimum, care descrie perechea de electroni complet delocalizată.

**V. Membru/președinte al comitetului organizatoric/științific, al comisiilor, consiliilor științifice de susținere a tezelor**

| Numele, prenumele | Evenimentul (conferință, consiliu de susținere etc.) | Perioada | Calitatea (membru, președinte ș.a.) |
|-------------------|--|----------|-------------------------------------|
|                   |  |          |                                     |

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

**Articole în reviste cu factor de impact WoS/ SCOPUS**

1. B Tsukerblat, A Palii, S Zilberg, D Korchagin, S Aldoshin, J. M. Clemente-Juan. Vibronic recovering of functionality of quantum cellular automata based on bi-dimeric square cells with violated condition of strong Coulomb repulsion. The Journal of Chemical Physics 157 (7), 074308 (2022).
2. A Palii, V Belonovich, S Aldoshin, B Tsukerblat. Prototype of cell for quantum cellular automata: Multimode vibronic model for a two-electron mixed valence molecular square. Chemical Physics 563, 111679 (2022)
3. A Palii, S Aldoshin, B Tsukerblat. Functional Properties of Tetrameric Molecular Cells for Quantum Cellular Automata: A Quantum-Mechanical Treatment Extended to the Range of Arbitrary Coulomb Repulsion. Magnetochemistry 8 (8), 92 (2022).
4. S Zilberg, Y Stekolshik, A Palii, B Tsukerblat. Controllable Electron Transfer in Mixed-Valence Bridged Norbornylogous Compounds: Ab Initio Calculation Combined with a Parametric Model and Through-Bond and Through-Space Interpretation. The Journal of Physical Chemistry A 126 (19), 2855-2878 (2022).
5. S Klokishner, S Ostrovsky, A Palii, B Tsukerblat. Cooperative Spin Transitions Triggered by Phonons in Metal Complexes Coupled to Molecular Vibrations. Magnetochemistry 8 (2), 24 (2022).
6. A Palii, S Aldoshin, B Tsukerblat. Towards the design of molecular cells for quantum cellular automata: critical reconsideration of the parameter regime for achieving functionality. Dalton Transactions 51 (1), 286-302 (2022).

**Data completării fișei 06.01.2023**

Semnătura

Țucherblat Boris