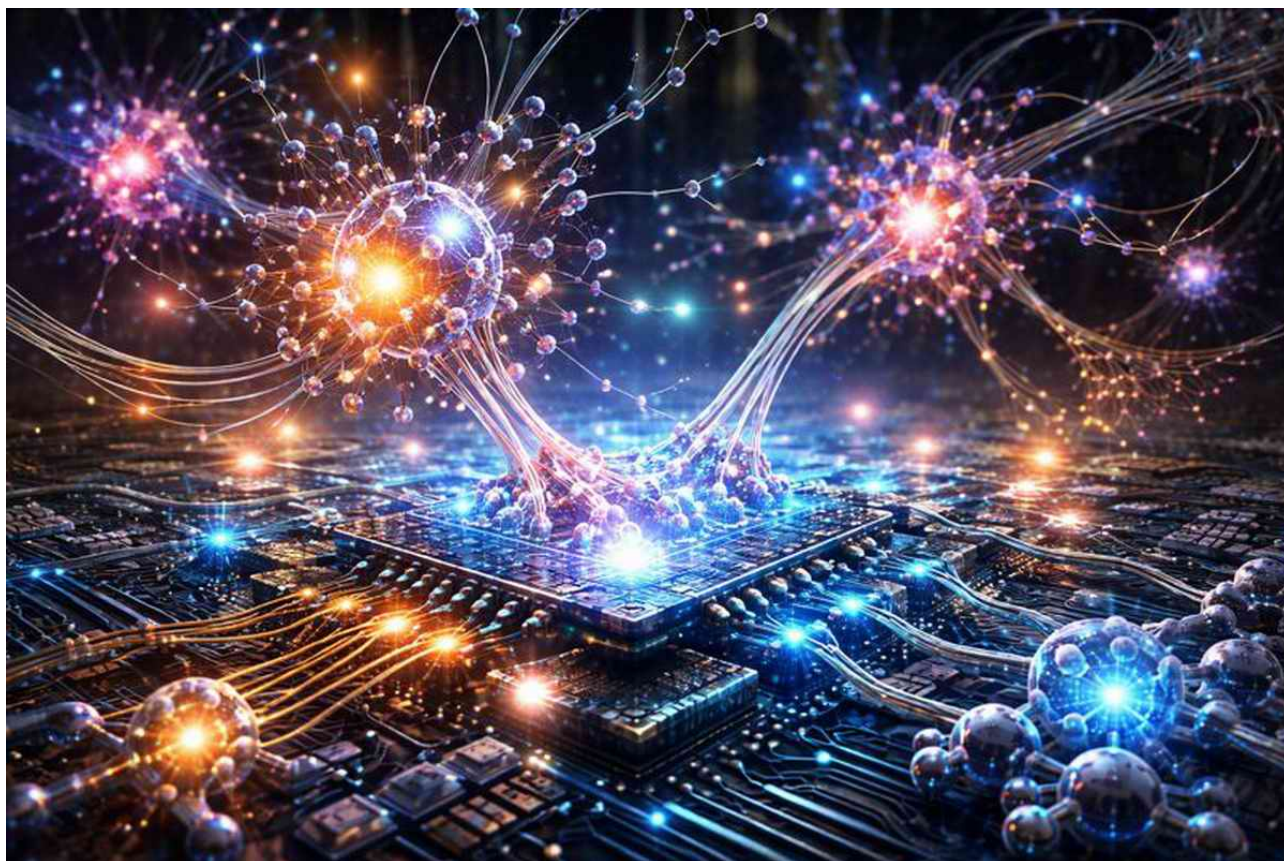


Материал, который думает сам: молекулярная электроника делает шаг к мозгоподобным вычислениям



Дата публикации: 02.01.2026

Идея вычислений без транзисторов долгое время казалась научной фантастикой, однако новые результаты в области молекулярной электроники показывают, что сама материя может стать вычислительной средой. Исследователи из Indian Institute of Science продемонстрировали, что крошечные молекулярные структуры способны выполнять функции, которые раньше требовали сложных схем из кремниевых компонентов. Речь идет не просто о хранении информации или передаче сигналов, а о принципиально ином подходе, при котором материал сам адаптируется и меняет свою роль в вычислительном процессе.

На протяжении десятилетий молекулярная электроника развивалась как альтернатива кремнию, обещая сверхмалые размеры и новые физические эффекты. Однако на практике молекулы внутри устройств вели себя слишком сложно: электроны перемещались по плотным сетям, ионы смещались, интерфейсы менялись со временем, а незначительные структурные различия

вызывали резкие нелинейные эффекты. Управлять таким поведением и тем более предсказывать его было чрезвычайно трудно, что ограничивало применение молекулярных компонентов в реальных вычислительных системах.

Параллельно развивалось направление нейроморфных вычислений, вдохновленное архитектурой человеческого мозга. Его цель состоит в том, чтобы объединить хранение данных, обработку сигналов и адаптацию в одном физическом носителе. Современные нейроморфные устройства, как правило, используют оксидные материалы и эффекты переключения проводящих нитей, но в большинстве случаев они лишь имитируют обучение за счет сложной схемотехники, а не обладают встроенной способностью к обучению на уровне материала.

Новое исследование объединяет эти два направления. Команда ученых Центра нанонауки и инженерии IISc показала, что правильно спроектированная молекулярная система может сама по себе быть вычислительным элементом. В основе работы лежат комплексы рутения, химические соединения которых обладают богатой электронной динамикой. Исследователи синтезировали 17 вариантов таких комплексов и систематически изучили, как изменения в молекулярной форме и ионном окружении влияют на транспорт заряда.

Результат оказался неожиданно универсальным. Одно и то же молекулярное устройство в зависимости от условий могло вести себя как элемент памяти, логический блок, селектор, аналоговый вычислитель или искусственный синапс. Фактически материал демонстрировал способность переключаться между цифровым и аналоговым режимами, изменять уровень проводимости и сохранять состояние, напоминая процессы обучения и забывания в биологических нейронных сетях.

Ключ к такой адаптивности заключается в химической природе материала. Окислительно-восстановительные процессы в молекулах рутения, движение противоионов и коллективное поведение электронов формируют сложную, но управляемую динамику. В отличие от классической электроники, где функция жестко задается схемой, здесь вычислительная роль возникает из самой физики и химии системы.

Особое значение имеет разработанная исследователями теоретическая модель, основанная на квантовой химии и физике многих тел. Она позволяет связать молекулярную структуру с макроскопическим поведением устройства, объясняя, как возникают эффекты переключения, релаксации и устойчивости состояний. Это важный шаг вперед, поскольку одна из главных проблем молекулярной электроники всегда заключалась в отсутствии надежного инструмента прогнозирования.

Практические перспективы такой технологии выходят далеко за рамки лабораторных экспериментов. Объединение памяти и вычислений в одном материале может радикально снизить энергопотребление вычислительных систем, устранив необходимость постоянной передачи данных между процессором и памятью. Это особенно важно для искусственного интеллекта, где энергозатраты на обучение и обработку информации растут экспоненциально.

В ближайших планах исследователей — интеграция молекулярных материалов с традиционными кремниевыми чипами. Такой гибридный подход может стать переходным этапом к новым архитектурам вычислений, в которых химия будет играть роль не вспомогательного элемента, а полноценного архитектора логики и обучения.

В более широком научном контексте эта работа меняет представление о том, что такое вычисление. Оно перестает быть исключительно алгоритмическим процессом, реализованным на жесткой аппаратной платформе, и все больше становится свойством самой материи. Если дальнейшие исследования подтвердят масштабируемость и надежность таких систем, молекулярные материалы могут стать основой вычислительных устройств, которые будут не просто обрабатывать данные, а адаптироваться и обучаться так же естественно, как это делает человеческий мозг.

Ссылка: «Молекулярно-инженерные мемристоры для реконфигурируемых нейроморфных функций» [DOI: 10.1002/adma.202509143](https://doi.org/10.1002/adma.202509143).