

Streszczenie popularnonaukowe

W obecnych czasach dużo uwagi poświęca się na poszukiwanie nowych funkcjonalnych materiałów, które pozwoliłyby na konstrukcję nowoczesnych **dysków pamięci o niespotykanej dotąd gęstości zapisu danych**, elementów **architektur komputerów kwantowych**, czy mających zastosowanie w ogólnie pojętej **spintronice**, czyli dziale elektroniki opartej na wykorzystaniu spinu zamiast tradycyjnie ładunku elektronu. Obiecującymi kandydatami mogącymi zaoferować pożądane do tych celów właściwości fizyczne są tzw. **magnesy jednocząsteczkowe** (z ang. *Single-Molecule Magnets*, SMMs), których pierwsi przedstawiciele zostali odkryci 25 lat temu. Są to paramagnetyczne kompleksy jonów metali przejściowych i ziem rzadkich (lantanowców), izolowane lub wbudowane w sieci koordynacyjne o różnej wymiarowości, które charakteryzują się obecnością pętli histerezy magnetycznej poniżej tzw. temperatury blokowania (T_B). Nietypowe jest to, że taka histereza ta nie jest wynikiem oddziaływań magnetycznych prowadzących do uporządkowania spinowego i powstawania domen, jak ma to miejsce w klasycznych magnesach znanych z życia codziennego. Ma ona podłoże czysto molekularne, pochodząc od specyficznej struktury elektronowej jonów metali umieszczonych w polu krystalicznym ligandów. Dlatego możemy takie izolowane cząsteczki lub jony traktować jako prawdziwe miniaturowe magnesy. Ich potencjalne zastosowania ograniczone są czasem (tzw. czasem relaksacji magnetycznej oznaczanym jako τ), w trakcie którego dana cząsteczka jest w stanie utrzymać swoje namagnesowanie po usunięciu przyłożonego wcześniej pola magnetycznego oraz niesamowicie niskimi temperaturami, poniżej których można efektywnie obserwować opisane zjawisko blokowania magnetyzacji. Gdyby udało się opracować nowe rodziny związków typu SMM charakteryzujące się wydłużonymi czasami τ prowadzącymi do histerezy magnetycznej obserwowanej w temperaturze pokojowej, realnie stanie się osiągnięcie miniaturyzacji urządzeń i pamięci elektronicznych na poziomie izolowanych cząsteczek chemicznych!

Po wielu latach intensywnych badań eksperymentalnych i teoretycznych posiadamy rozległą wiedzę dotyczącą tzw. statycznych właściwości struktury elektronowej, które są wymagane do zaobserwowania blokowania magnetyzacji i konstrukcji materiałów molekularnych typu SMM o potencjalnie ogromnych barierach reorientacji spinu oraz wynikających z tego długich czasach relaksacji. Jednakże stosunkowo mało wiadomo o dokładnym przebiegu **procesów relaksacji magnetycznych wywołanych drganiami sieci krystalicznej**, czyli tzw. oddziaływaniami spin-fonon, w rzeczywistych nanomagnesach molekularnych, które zawsze ułożone są w charakterystyczny sposób w sieci krystalicznej. Mając powyższy stan wiedzy na uwadze, głównym celem projektu jest kompleksowa symulacja czasu i ścieżek relaksacji magnetyzacji wywołanych sprzężeniami wibronowymi w obrębie sieci krystalicznych wybranych magnesów molekularnych typu SMM. Jako obiekty do naszych badań wyselekcjonujemy kandydatów z unikalnej rodziny **jednocząsteczkowych magnesów molekularnych opartych na jonach lantanowców wbudowanych w sieci koordynacyjne** zbudowane z magnetycznie anizotropowych jonów metali ziem rzadkich i diamagnetycznych kompleksów metali przejściowych. Skupiając się na tym typie nanomagnesów molekularnych, spróbujemy odpowiedzieć na nietrywialne i niemal kompletnie niezbadane zagadnienie dotyczące tego, jak sieci krystaliczne oparte na sieciach koordynacyjnych wpływają na zjawisko powolnej relaksacji magnetycznej wbudowanych cząsteczek typu SMM opartych na jonach lantanowców. Żeby osiągnąć ten cel, planujemy zastosować szereg **relatywistycznych metod 'ab initio' opartych na wielo-konfiguracyjnych obliczeniach kwantowo-chemicznych (np. CASSCF), jak i tych opartych na teorii funkcjonalów gęstości (DFT)** w celu pozyskania efektywnych parametrów hamiltonianu odpowiedzialnego za **sprężenia spin-fonon**. Następnie, poprzez rozwiązanie kwantowych równań głównych dla zredukowanych macierzy gęstości badanych układów uzyskamy informację o ewolucji magnetyzacji w czasie, co skonfrontujemy z zebranymi wynikami eksperymentalnymi użytymi jako narzędzie weryfikacyjne. Dzięki przeprowadzonym obliczeniom teoretycznym wskażemy najbardziej efektywne ścieżki prowadzące do utraty magnetyzacji i umożliwimy ich wyeliminowanie poprzez zaproponowanie potencjalnych modyfikacji dla badanych układów. Jesteśmy przekonani, że tego typu badania mogą wnieść bardzo dużo do zrozumienia dokładnych mechanizmów rządzących dynamiką spinową układów typu SMM i doprowadzą do powstania związków o znacząco ulepszonej charakterystyce magnetycznej, które z powodzeniem będą mogły być wykorzystane do konstrukcji przyszłych pamięci o ekstremalnie dużej gęstości zapisu danych oraz wysoko wydajnych urządzeniach spintronicznych.