Ogólnym celem projektu są badania kwantowych cieczy spinowych (QSL) i efektu magnetokalorycznego (MCE) w silnie sfrustrowanych materiałach molekularnych w procesach chłodzenia opartego na demagnetyzacji materiałów. Kwantowe przejścia fazowe, takie jak QSL, wynikają z fluktuacji kwantowych zgodnie z zasadą nieoznaczoności Heisenberga, w przeciwieństwie do konwencjonalnych przejść fazowych, które występują z powodu fluktuacji termicznych. Zmieniając parametry fizyczne, takie jak pole magnetyczne, można osiągnąć nagłą zmianę stanu podstawowego układu wielu ciał, którą można wykorzystać do celów technologicznych.

QSL to egzotyczny stan materii charakteryzujący się brakiem porządku magnetycznego dalekiego zasięgu, wysoce splątanym zdegenerowanym stanem podstawowym i występowaniem spinonów, czyli kwazicząstek, które zachowują się inaczej niż podstawowe cząstki tworzące zwykłą materię, takie jak fermiony lub bozony. QSL można znaleźć tylko w sfrustrowanych magnesach, gdy konkurencyjne oddziaływania między momentami magnetycznymi nie mogą być jednocześnie spełnione ze względu na geometrię sieci. QSL może pojawić się w szerokiej gamie dwu- i trójwymiarowych materiałów (np. trójkątnych, o strukturze plastra miodu lub sieci kagome), zwłaszcza posiadających stan podstawowy J = 1/2.

W MCE materiał nagrzewa się lub ochładza podczas przykładania, lub usuwania pola magnetycznego, co można wykorzystać w cyklu termodynamicznym, aby osiągnąć nawet temperatury poniżej jednego kelwina. Przewidywania teoretyczne wskazują, że adiabatyczna zmiana temperatury związana z MCE jest bardziej znacząca dla silnie sfrustrowanych antyferromagnetyków niż zwykłych magnesów niefrustrowanych. Co więcej, w układach z kwantowym przejściem fazowym, np. QSL, temperatura szybko spada wraz z polem magnetycznym w pobliżu kwantowego punktu krytycznego (QCP), tj. punktu, w którym zachodzi ciągłe przejście fazowe w zerze absolutnym. W ten sposób połączenie zjawisk krytycznych z MCE skutkuje wysoce wydajnym chłodzeniem magnetycznym, nazywanym kwantowym chłodzeniem krytycznym (QCR).

Magnetyki molekularne to metaliczne lub metaloorganiczne związki koordynacyjne składające się z dwóch rodzajów bloków budulcowych: jonów magnetycznych i ligandów. Można je projektować na wiele sposobów, wybierając różne kombinacje bloków budulcowych podczas syntezy. Pomimo obiecującego potencjału wykorzystania chemii koordynacyjnej i supramolekularnej do realizacji QSL, obszar ten pozostaje słabo zbadany. Dlatego proponowany projekt ma na celu wypełnienie luki w tym obszarze badań poprzez następujące cele i odpowiedzi na pytania:

1. Synteza i zbadanie opisanych sfrustrowanych magnesów molekularnych pod kątem MCE. Czy można wzmocnić MCE w sfrustrowanych materiałach molekularnych?

2. Przygotowanie listy obiecujących sfrustrowanych materiałów molekularnych, które mogą potencjalnie realizować QSL. Jaki rodzaj sieci, centrów metalicznych i ligandów powinien być użyty w syntezie, aby stworzyć stan QSL?

3. Synteza wybranych materiałów z listy, aby zidentyfikować związki ze zwiększonym MCE w pobliżu QCP. Wytworzenie takiego materiału jest głównym celem projektu.

4. Opracowanie i wykorzystanie ram teoretycznych w celu zrozumienia fizyki leżącej u podstaw QSL i MCE w wybranych i scharakteryzowanych eksperymentalnie sfrustrowanych magnetykach molekularnych. Wykorzystane zostaną metody diagonalizacji macierzy hamiltonianu, przybliżenia pola molekularnego i kwantowego Monte Carlo oraz uwzględnienie (nie)jednorodności sprzężeń wymiany, efektów drgań sieci krystalicznej, obecności defektów i wpływu różnych form próbek: proszku, monokryształów. Jakie warunki muszą być spełnione, aby zrealizować QSL?