

Wyjaśnienie własności magnetycznych i elektronowych wybranych nanomagnetyków molekularnych na bazie jonów chromu i wanadu

Piotr Kozłowski

Nanomagnetyki molekularne są w ostatnich latach intensywnie badane ze względu na potencjalne zastosowania w informatyce kwantowej, czy też jako materiał do budowy wydajnych nośników informacji. Możliwość obserwacji zjawisk kwantowych w skali makro czyni je także interesującym obiektem badań teoretycznych. W obu przypadkach bardzo ważne jest dokładne modelowanie własności magnetycznych i elektronowych tych molekuł.

W niniejszej prezentacji przedstawię wyniki modelowania sfrustrowanych pierścieni molekularnych zawierających 9 jonów chromu (Cr_9), oraz kulistych molekuł na bazie wanadu o mieszanych stanach walencyjnych ($\text{Br@V}_{16}\text{O}_{38}$ i $\text{X@V}_{22}\text{O}_{54}$ $\text{X}=\text{ClO}_4$, SCN , VO_2F_2). Modelowanie zostało wykonane metodą spinowych Hamiltonianów efektywnych wykorzystując różne dokładne metody numeryczne (kwantowa macierz transferu, dokładna diagonalizacja, metoda iteracyjna [power method]), oraz metody sztucznej inteligencji (algorytmy genetyczne).

Cr_9 uważany jest za prototyp molekularnego układu sfrustrowanego dlatego dla tego związku zbadano dokładnie zjawisko frustracji magnetycznej, w tym jej związek ze splątaniem kwantowym. $\text{Br@V}_{16}\text{O}_{38}$ krystalizuje w skomplikowanej strukturze kryształu bliźniaczego co bardzo utrudnia właściwy opis jego struktury i własności magnetycznych. Zastosowane modelowanie umożliwiło nie tylko wyjaśnienie sprzecznych z intuicją własności magnetycznych tego związku, ale także rzuciło światło na jego strukturę i własności elektronowe. $\text{X@V}_{22}\text{O}_{54}$ wykazuje różne własności magnetyczne i stany walencyjne, w tym takie, które wskazują na obecność wędrownych elektronów, w zależności od molekuly gościnniej X. Stosując spójną metodę modelowania przy pomocy Hamiltonianów efektywnych wykorzystującą wyniki obliczeń DFT, oraz zharmonizowaną z eksperymentem udało się ustalić stany walencyjne wszystkich trzech molekuł ($\text{X}=\text{ClO}_4$, SCN , VO_2F_2), oraz wyjaśnić ich własności magnetyczne.