Celem postulowanego projektu jest opracowanie procedury syntezy uporządkowanych, hybrydowych cienkich filmów krzemionkowych aktywowanych jonami metali i molekułami magnetycznymi, ich synteza oraz dokładne określenie własności fizycznych.

Aplikantka zaproponowała badania zupełnie pionierskiego materiału o ogromnym potencjale aplikacyjnym. Zgodnie z jej stanem wiedzy podobne materiały nie były wcześniej wytwarzane.

Proponowane tu filmy posiadają dwuwarstwową budowę. Składają się z warstwy wychwytującej aktywne molekuły oraz warstwy mezoporowatej o heksagonalnie uporządkowanych kanałach, prostopadłych do podłoża. Każdy z kanałów zawiera pojedynczą molekułę bądź jon metalu na spodzie. Dzięki takiej budowie, aktywne molekuły lub jony nie oddziałują ze sobą - są rozdzielone ścianami krzemionkowymi. Możliwe jest zatem uzyskanie pojedynczych dwustanowych jednostek magnetycznych (dla filmów aktywowanych molekułami magnetycznymi) o rozmiarze do 8 nm uwzględniając grubość ścian krzemionkowych. Co więcej jednostki magnetyczne są rozłożone w sposób regularny w otrzymanej warstwie.

Pierwsza warstwa proponowanych ty hybrydowych filmów to krzemionka amorficzna zawierająca odpowiednie grupy kotwiczące, nałożona bezpośrednio na substrat. Zadaniem grup kotwiczących jest wiązanie jonów lub molekuł magnetycznych w czasie aktywacji. Na warstwę krzemionki z grupami kotwiczącymi nałożona będzie warstwa krzemionki mezoporowatej typu SBA-15 o orientacji porów prostopadłej do substratu. Krzemionka SBA-15 posiada porowatą budowę - składa się z heksagonalnie uporządkowanych kanałów o średnicy do 5 nm (w zależności od użytego surfaktantu i warunków syntezy) o amorficznych ścianach. Po nałożeniu na uprzednią warstwę krzemionkową utworzy ona jednorodną warstwę o strukturze plastra miodu (w przybliżeniu). Dzięki niewielkiej średnicy porów w warstwie krzemionki mezoporowatej, możliwe jest uzyskanie jednej grupy kotwiczącej na spodzie każdego z porów. Jest to oczywiście proces statystyczny, więc możliwe jest umiejscowienie więcej, niż jednej grupy kotwiczącej na spodzie mezopora, jednak dzięki niewielkiej średnicy mezoporów, zbliżonej do średnicy molekuły magnetycznej, każdy z kanałów będzie aktywowany jednym magnesem molekularnym.

Planuje się aktywację otrzymanych filmów dwuwarstwowych jonami metali: srebra i miedzi oraz molekułami magnetycznymi - Mn_{12}. Podkreślić tu należy, że największy potencjał aplikacyjny będzie miał materiał aktywowany molekułami magnetycznymi. Filmy aktywowane jonami metali są jednak dużo łatwiejsze do otrzymania i charakterystyki. Ich synteza i badanie będą miały czysto podstawowy charakter, a uzyskane wyniki (własności strukturalne filmów, koncentracja grup kotwiczących) posłużą jako punkt wyjścia do syntezy filmów aktywowanych molekułami magnetycznymi (planuje się użycie tych samych grup kotwiczących dla jonów srebra, co Mn_{12}).

Podkreślić należy, że aplikantka posiada duże doświadczenie w nanoszeniu cienkich warstw krzemionkowych - było to przedmiotem wcześniejszego projektu, w którym aplikantka była głównym wykonawcą. Materiały krzemionkowe zawierające jony metali są również tematem jej rozprawy doktorskiej. Procedura zostanie przygotowana w oparciu o zdobyte wcześniej doświadczenia i dane literaturowe.

Wnioskodawca proponuje podział badań na dwa etapy: optymalizację procesu syntezy oraz charakterystykę otrzymanych (i zweryfikowanych) materiałów.

W pierwszej fazie opracowane zostaną dokładne procedury przygotowania kilku typów cienkich filmów o proponowanej tu strukturze. Planuje się przygotowanie filmów na kilku typach podłoży (m.in. wafle krzemowe, szkło, mika), co ułatwi późniejszą optymalizację struktury. Wytworzone zostaną filmy o co najmniej dwóch średnicach porów krzemionkowych: 2,5 nm (surfaktant CTAB) oraz 4,5 nm (surfaktant P123). Możliwość regulacji średnicy porów pozwoli na uzyskanie kluczowej cechy proponowanych tu materiałów - jeden kanał krzemionkowy zawiera dokładnie jedną molekułę magnetyczną (średnica molekuły Mn_{12} to 1,5 nm).

Zgodnie z opracowanymi metodami syntezy przygotowane zostaną materiały badawcze. Otrzymane hybrydowe cienkie warstwy poddane zostaną serii badań podstawowych, mających na celu weryfikację ich struktury mikroskopowej oraz molekularnej.

Mikrografia sił atomowych AFM pozwoli na ocenę jakości i określenie gładkości uzyskanych warstw.

Mikrografia elektronowa transmisyjna TEM da bezpośredni obraz struktury filmu. Badanie odpowie na pytanie czy pory są ułożone prostopadle do podłoża, jak zakładano, czy rozkład porów jest regularny i heksagonalny, pozwoli na zgrubne wyeliminowanie zanieczyszczeń. Podkreślić należy, że badanie będzie możliwe dzięki innowacyjnej metodzie pozyskiwania wolnych cienkich filmów, opracowanej przez grupę badawczą, w której działa aplikantka.

Niskokątowa refraktometria rentgenowska, oprócz dostarczenia informacji strukturalnych, pozwoli na określenie porowatości materiału (charakterystyczne dla porowatych materiałów maksimum z ugięciem dla bardzo niskich kątów) i grubości poszczególnych warstw (obliczenie na podstawie odległości pomiędzy refleksami Kiessiga).

Szerokokątowa dyfraktometria rentgenowska pozwoli na wykrycie ewentualnych zanieczyszczeń substancją aktywującą.

Weryfikacja struktury molekularnej będzie możliwa dzięki spektrometrii Ramana wspomaganej symulacjami DFT. Metoda ta była stosowana wcześniej z dużym powodzeniem do określenia struktury molekularnej aktywowanej krzemionki SBA-15 przez grupę, w której pracuje aplikantka. Na podstawie symulacji numerycznych określone zostaną piki charakterystyczne występujące w widmie Ramana dla określonych typów wiązań. Następnie przeprowadzone zostaną pomiary eksperymentalne spektrum Ramana dla otrzymanych próbek. Poprzez zestawienie wyników teoretycznych z eksperymentalnymi dla próbek rozważanych i referencyjnych, możliwe jest dokładne określenie struktury molekularnej aktywnych grup. Podkreślić należy, że aplikantka posiada już modele numeryczne części proponowanych materiałów.

Seria proponowanych tu badań pozwoli na weryfikację skuteczności procesu syntezy i ewentualną optymalizację procedur. W wyniku realizacji pierwszej fazy badań uzyskane zostaną materiały o założonej strukturze.

W drugiej fazie badań otrzymane materiały poddane zostaną serii badań podstawowych w celu dokładnego określenia ich własności fizycznych.

Własności elektryczne otrzymanych warstw zostaną zbadane za pomocą mikroskopii AFM (przewodnictwo wzdłuż porów oraz równolegle do powierzchni substratu) oraz szerokopasmowej spektroskopii dielektrycznej (własności dielektryczne).

Własności magnetyczne zostaną określone za pomocą magnetometrii SQUID.

Rezultatem projektu będą nowatorskie materiały wraz z zestawem charakterystyk otrzymanych dzięki analizie kompletu badań podstawowych. Przewiduje się publikację co najmniej dwóch artykułów o zasięgu międzynarodowym w czasopismach posiadających impact factor.

Motywacją do podjęcia przez aplikantkę tematyki badawczej był ogromny potencjał aplikacyjny proponowanych tu materiałów, choć projekt ma charakter badań podstawowych. Utylitarne podejście do realizacji projektów naukowych pozwala na zaplanowanie metodyki badawczej w sposób logiczny i zwarty, mimo realizacji jedynie badań podstawowych.

Zaproponowany w niniejszym wniosku sposób syntezy cienkich warstw jest realizacją postulatu Erica Drexlera: sposób syntezy nanomateriałów powinien być tak przygotowany, aby atomy same ułożyły się tak, aby utworzyć nanonarzędzie lub materiał o pożądanych właściwościach. W tym przypadku są to głównie własności predystynujące do zastosowań w mikroelektronice i elektronice molekularnej.

Oczywistym zastosowaniem proponowanych tu materiałów są pamięci komputerowe o niespotykanej dotąd gęstości (pojemności). Każda z porów krzemionkowych, ułożonych regularnie w postaci cienkiego filmu, może być traktowany jako dwustanowa jednostka magnetyczna, której polaryzacja może być zmieniana za pomocą pola magnetycznego (np. igła skaningowa mikroskopu). Biorąc pod uwagę średnicę porów możliwą do otrzymania oraz grubość ścian krzemionkowych, możliwe jest otrzymanie komórki pamięci wielkości od 5 do 8 nm. Daje to do $4 \cdot 10^{10}$ bitów w mm^2 filmu, co jest wartością obecnie niespotykaną.

Proponowane tu hybrydowe cienkie filmy mogą pełnić rolę jednostek przetwarzających w neuronach molekularnych typu Hopfielda - podstawowych składowych sieci molekularnej typu Hopfielda - urządzeniu nad którym obecnie pracuje grupa badawcza do której należy aplikantka. Postulowane urządzenie może mieć ogromny wpływ na szeroko rozumianą inteligencję obliczeniową. Możliwe będzie stworzenie sieci neuronowej działającej w sposób analogiczny do szkła spinowego, a nie symulującej jedynie jego działania. Pozwoli to na stworzenie pamięci autoasociacyjnych o niespotykanej dotąd pojemności i szybkości działania, a także systemów optymalizujących odpowiednich dla zagadnień wielokryterialnych.

Poza ogromnym potencjałem aplikacyjnym proponowane tu materiały są niezwykle interesujące ze względu na ich przewidywane własności fizyczne. Żadne podobne rozwiązanie nie zostało dotychczas zaproponowane w literaturze. Dzięki zastosowaniu matrycy krzemionkowej o specyficznej budowie, możliwe będzie badanie zachowania się odseparowanych, pojedynczych molekuł i jonów (możliwe będzie również badanie grup kilku jonów, w zależności od koncentracji grup kotwiczących). Ogólnie znana jest niestabilność pojedynczych molekuł magnetycznych Mn_{12} przy kontakcie z różnego typu podłożami. Jak jednak zaobserwowano podczas badań na proszkach SBA-15 aktywowanych Mn_{12}, ich własności nie zmieniają się. Proponowany tu projekt pozwoliłby zbadać sytuację graniczną - jeden por zawiera jedną molekułę magnetyczną. W przypadku uzyskania stabilnego związku, materiał zapewne znalazłby zastosowanie komercyjne, możliwe byłoby również kontynuowanie badań pod kontem rozwojowym i wdrożeniowym (ewentualny projekt w NCBiR).