

Zasadnicze cele projektu to synteza, charakterystyka, opis teoretyczny, oraz komputerowe modelowanie właściwości związków jonów przejściowych (3d/4f) wykazujących właściwości nanomagnetyków molekularnych (NMM) zoptymalizowanych dla zastosowań w komputerach kwantowych przyszłości. Prace eksperymentalne będą wspierane modelowaniem komputerowym pozwalającym przewidywać pożądaną właściwość wykorzystując metody semiempiryczne oraz metody chemii kwantowej - oparte na teorii funkcjonału gęstości (ang. *density functional theory*: DFT) oraz podejściach *ab initio*. Umożliwi to racjonalne projektowanie na poziomie molekularnym NMM o wstępnie określonych właściwościach uwzględniając źródła anizotropii magnetycznej i czynniki kontrolujące wysokość bariery energii dla odwrócenia namagnesowania. Celem prac teoretycznych jest również wyjaśnienie nierozwiązanych lub kontrowersyjnych aspektów, m.in., formy uogólnionych Hamiltonianów spinowych dla pojedynczych jonów 3d/4f i klastrów wymiennie sprzężonych, rola członów wyższego rzędu w uogólnionym Hamiltonianie spinowym dla NMM, symetria Hamiltonianów *multispin* i *giant-spin*, rola sprzężenia spin-orbita w opisie NMM. **Hipoteza badawcza** zakłada, że wyjaśnienie w/w aspektów i trafny dobór do syntezy jonów 3d/4f i ligandów, wsparty modelowaniem komputerowym, pozwoli uzyskać NMM o architekturze supramolekularnej z koordynacją ligandów stabilizujących stan podstawowy maksymalnie korzystny dla zoptymalizowania właściwości pod kątem praktycznych zastosowań w komputerach kwantowych przyszłości.

Badania będą realizowane w ramach międzynarodowej i interdyscyplinarnej grupy chemików i fizyków i będą prowadzone we ścisłej współpracy eksperymentatorów z teoretykami. Międzynarodowe eksperymentalne (Japonia) i teoretyczne (Turcja) badania będą możliwe dzięki porozumieniu z naszymi kolegami o bezpłatnej współpracy prowadzącej do wspólnych publikacji. **Cześć eksperymentalna** obejmuje syntezę i charakterystykę nowych związków. W oparciu o wstępny wybór jednostki chinolinowej, jako podstawowego bloku budulcowego do kondensacji z odpowiednimi aldehydami/ketonami zostanie otrzymanych szereg ligandów typu zasad Schiffa, jako prekursorów nowych architektur metalosupramolekularnych o potencjalnych właściwościach NMM. Rentgenowskie badania strukturalne posłużą ustaleniu koordynacji centrów metalicznych, konformacji ligandów i sposobów tworzenia trójwymiarowych sieci metalosupramolekularnych w związkach koordynacyjnych. Charakterystyka otrzymanych związków zostanie przeprowadzona z wykorzystaniem szeregu komplementarnych technik: spektroskopia optyczna - pomiary emisji i absorpcji, elektronowy rezonans magnetyczny (EMR) - pomiary w paśmie X i Q w różnych temperaturach, oraz temperaturowe badania namagnesowania i podatności magnetycznej z wykorzystaniem magnetometru SQUID w stałym i zmiennym polu magnetycznym i przy różnej częstotliwości pola. Badania EMR w wysokich polach magnetycznych i częstotliwościach (HMF-EMR), i w szerokim zakresie temperatury i ciśnienia, mają charakter nowatorski i przekraczają dotychczasowe granice wiedzy. Pomiary HMF-EMR będą przeprowadzone w Japonii na unikalnym sprzęcie niedostępnym w Polsce. **Cześć teoretyczna** obejmuje opis i modelowanie właściwości związków NMN skierowane na w/w cele. Do opisu własności jonów 3d/4f w molekułach NMM użyjemy teorii pola krystalicznego i teorii Hamiltonianów spinowych, a dla wymiennie sprzężonych klastrów - podejście Hamiltonianu *multispin* i *giant-spin*. Do modelowania właściwości spektroskopowych i magnetycznych NMN użyjemy metody semiempirycznej i metody chemii kwantowej [DFT/*ab initio*].

Całościowe badanie właściwości spektroskopowych i magnetycznych, połączone z analizą teoretyczną wyników, jest nowatorskim podejściem, ponieważ dotąd badania były prowadzone rozłącznie, a porównanie wyników dostarczanych przez obie komplementarne metody było bardzo utrudnione z uwagi na stosowanie różnych parametrów, zarówno teoretycznych, jak i mierzalnych doświadczalnie. Poszukiwanie potencjalnych NMM jest nowatorskie i wykracza poza dotychczasowy stan wiedzy. Projekt ma duże potencjalne znaczenie także dlatego, że (a) zjawiska obserwowane w bardzo wysokich polach magnetycznych używanych w HMF-EMR nie są w pełni zbadane, (b) w/w aspekty teoretyczne nie są dotąd rozwiązane lub kontrowersyjne. Tematyka jest wiodąca w skali światowej z uwagi na zjawisko makroskopowego kwantowego tunelowania namagnesowania oraz ważne potencjalne zastosowania, np. w komputerach kwantowych przyszłości, nanotechnologiach i spintronice. Projekt ma charakter poznawczy i służy poszerzeniu podstawowej wiedzy o NMM oraz opracowaniu alternatywnych metod syntezy NMM. Charakterystyka właściwości spektroskopowych i magnetycznych zsyntetyzowanych NMM w korelacji ze strukturą krystaliczną oraz komputerowe modelowanie i przewidywanie tych właściwości posłużą do racjonalnego projektowania nowych NMM. Modelowanie właściwości układów NMM w zależności od czynników zewnętrznych pozwoli na pogłębienie fundamentalnej wiedzy dotyczącej związków pomiędzy strukturą krystalograficzną a parametrami doświadczalnymi. Otrzymanie i charakterystyka strukturalna, spektroskopowa i magnetyczna potencjalnych NMM, przy użyciu szeregu komplementarnych technik pomiarowych, także nowoczesnych technik HMF-EMR, które dostarczą danych do komputerowego modelowania i przewidywania właściwości wybranych kompleksów NMM, mają nowatorski charakter nie tylko z powodu nowych związków, które będą otrzymane, ale również z uwagi na całościowe połączenie badań teoretycznych, eksperymentalnych i obliczeniowych. Współpraca zespołu eksperymentatorów i teoretyków umożliwi synergię, która doprowadzi do znaczących nowych odkryć o zasadniczym znaczeniu dla postępu nauki i praktycznych zastosowań NMM.