

## POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU

Wykładniczo rosnąca ilość wytwarzanej przez komputery informacji powoduje zwiększone zapotrzebowanie na pamięć dyskową. W chwili obecnej wydaje się, że nowa generacja dysków nie może się ograniczać do nowych materiałów, ale wymagana jest całkowicie nowa koncepcja przechowywania informacji. Obecnie w typowych dyskach magnetycznych potrzeba kilkuset ziaren o średnicy ok. 10 nm dla przechowania jednego bitu informacji. Dalsze zmniejszanie liczby ziaren lub ich średnicy dla zapamiętania bitu może wpływać na stosunek sygnał/szum i może prowadzić do utraty informacji. Dlatego naukowcy pracują nad całkowicie nową koncepcją pamięci magnetycznych. Jedną z możliwości jest zastosowanie struktur hybrydowych złożonych z dwu-wymiarowych nanomateriałów (2D-NM) oraz jednomolekułowych magnesów (SMMs). Układy dwu-wymiarowe, takie jak grafen, h-BN, MoS<sub>2</sub>, wykazują intrygujące własności i w chwili obecnej są rozważane jako najbardziej obiecujące materiały dla przyszłościowych zastosowań na polu nanoelektroniki, optoelektroniki, spintroniki, oraz nowatorskich inteligentnych materiałów. Funkcjonalizacja 2D-NM poprzez adsorpcję SMMs może prowadzić do sieci magnetycznych nano-objektów na powierzchni układu, a dalej do nowatorskich technologii opartych na spinie. W chwili obecnej prowadzone są intensywne badania eksperymentalne takich struktur (np. projekty Europejskiej Rady Naukowej *Gram3*, *MAGMETALS*, oraz *MOKNANOMAS*), w których poszukuje się nowych spintronicznych funkcjonalności w układach hybrydowych 2D-NM/SMM. Niestety, pomimo dużego nakładu pracy eksperymentalnej, obserwowane zjawiska nie są całkowicie zrozumiałe.

W tym projekcie zamierzamy przeprowadzić obszerne badania teoretyczne stabilności struktur hybrydowych 2D-NM/SMM oraz zbadać naturę oddziaływań magnetycznych w tych strukturach. W dalszej kolejności chcemy ustalić jak moment magnetyczny jednomolekułowych magnesów może zostać zmodyfikowany poprzez czynniki zewnętrzne takie jak pole elektryczne, pole magnetyczne, światło, prąd ładunkowy lub spinowy płynący w dwuwymiarowym materiale stanowiącym podstawę struktury hybrydowej. Przeprowadzone badania powinny rzucić światło na fizyczne mechanizmy determinujące wielkość i anizotropię momentów magnetycznych w jednomolekułowych magnesach oraz wskazać drogę do inżynierii chemicznej struktur hybrydowych. Stawiamy hipotezę, że wieloskalowe narzędzia teoretyczne opracowane w projekcie pozwolą na (i) ustalenie i zrozumienie mechanizmów fizycznych determinujących własności struktur hybrydowych, oraz (ii) wiarygodne, dokładne, ilościowe przewidywanie własności struktur badanych eksperymentalnie, co pozwoli nam na wyselekcjonowanie układów hybrydowych szczególnie obiecujących dla przyszłościowych technologii bazujących na spinie.

W projekcie przedstawiono program ambitnych i nowatorskich badań naukowych wychodzących poza standardowe obliczenia własności materiałów, które wzbogacą teoretyczną fizykę materii skondensowanej, chemię kwantowej i naukę o materiałach. Po pierwsze w projekcie planowane jest opracowanie najbardziej zaawansowanej metody obliczania stanów spinowych molekuł na bazie teorii funkcjonału gęstości. Zamierzeniem projektu jest: (i) wykonanie najbardziej zaawansowanych badań magnetyzmu w strukturach hybrydowych 2D-NM/SMM, a także (ii) badanie możliwości modyfikacji momentów magnetycznych przez pole elektryczne, pole magnetyczne, światło, czy naprężenia. W projekcie zostanie opracowana metoda pozwalająca na realistyczne modelowanie układów hybrydowych 2D-NM/SMM o geometriach odpowiadających eksperymentalnie badanym strukturom. Dlatego przeprowadzone badania mają znaczenie tylko dla podstawowych badań w dziedzinie fizyki czy chemii, ale także dla przyszłościowej nanoelektroniki i spintroniki, które określą dalszy rozwój technologii informacyjnych wpływając na naszą cywilizację.