

Projektowanie obliczeniowe materiałów magnetycznych na podstawie sieci metaloorganicznych

Materiały magnetyczne są wykorzystywane w wielu urządzeniach, z którymi mamy do czynienia na co dzień: silniki elektryczne w sprzęcie AGD i transporcie; przechowywanie danych w smartfonach i komputerach; urządzenia medyczne, takie jak MRI. Wszystkie te zastosowania wymagają magnesów o różnym natężeniu pola, temperaturze pracy, wielkości i parametrach wagowych. Konwencjonalne magnesy są najczęściej oparte o materiały nieorganiczne, w tym metale przejściowe i ich tlenki oraz metale rzadkie. Podczas gdy nieorganiczne materiały magnetyczne wytwarzają silne pola i namagnesowanie w temperaturze pokojowej, ich dostrajalność w zasadzie ograniczona. Dlatego syntetyczne materiały magnetyczne coraz częściej zawierają komponenty organiczne albo w postaci materiałów czysto organicznych, albo nieorganiczno-organicznych układów hybrydowych.

W tym projekcie zajmujemy się projektowaniem materiałów magnetycznych opartych o sieci metaloorganiczne (angl. Metal-organic framework, MOF). MOFy to modułowe materiały zbudowane z atomów metali połączonych cząsteczkami organicznymi jako łącznikami. Podczas gdy atomy metali z niesparowanymi elektronami przenoszą moment magnetyczny, to organiczne łączniki pozwalają kontrolować odległość między centrami magnetycznymi i ich orientację, wpływając w ten sposób na ogólną wydajność magnetyczną materiału. Jednak nie jest takie oczywiste, jak wybrać łączniki, które wytwarzałyby MOFy o pożądanej wydajności magnetycznej. Powodem tego jest to, że istnieje wiele sposobów, w jakie metale i łączniki mogą układać się w strukturę krystaliczną, tworząc tak zwane polimorfy, które są materiałami o innym zachowaniu magnetycznym.

Możliwe jest eksperymentalne zbadanie różnych układów pakowania i wybranie struktury oferującej poszukiwany przez nas rodzaj działania magnetycznego. Jednak znalezienie odpowiednich struktur w tego rodzaju eksperymentach może zająć dużo pracy.

Celem tego projektu jest usprawnienie projektowania magnetycznych MOFów za pomocą metody przewidywania struktury krystalicznej (angl. crystal structure prediction, CSP) w celu zbadania różnorodności możliwych struktur MOFów na komputerze, znalezienia tych, które według przewidywań będą oferować pożądane właściwości magnetyczne, a następnie zsyntetyzowanie tych materiałów w laboratorium. Takie podejście skróci czas i zmniejszy koszty projektowania magnetycznych MOFów, jednocześnie pogłębiając naszą wiedzę na temat działania tych materiałów.