

Ab-initio metody Greena opisujące magnetyczne związki z silnym sprzężeniem spinowo-orbitalnym

Motywacja:

Magnetyzm jest prawdopodobnie najstarszym kolektywnym zjawiskiem kwantowym mającym praktyczne zastosowania w igłach kompasów od ponad 2000 lat. Już starożytni Chińczycy, używali magnetytu do ustalenia orientacji ziemskiego pola magnetycznego nie znając jego podstawowych właściwości kwantowych. Od tego czasu odkryto wiele materiałów kwantowych wykazujących przejścia fazowe do stanów o uporządkowanych, takich jak materiały ferro-, ferri-, antyferromagnetyczne, a ostatnio także altermagnetyczne.

Materiały magnetyczne umożliwiają niezliczone zastosowania technologiczne. Są niezbędnymi elementami głośników, silników elektrycznych w sprzęcie AGD, generatorów indukcyjnych w turbinach wiatrowych i hamulców regeneracyjnych w samochodach elektrycznych. W nowoczesnej technologii komputerowej są one wykorzystywane w urządzeniach do przechowywania informacji. Jednak pomimo ich ogromnego znaczenia technologicznego dla istniejących i rozwijających się technologii, postęp w opracowywaniu nowych materiałów magnetycznych o ulepszonych właściwościach, takich jak magnesy molekularne czy poszukiwaniu nowych materiałów altermagnetycznych nie jest łatwy. Dzieje się tak, ponieważ związki magnetyczne są zwykle otrzymywane empirycznie w procesie syntezy nieorganicznej jako ciała stałe lub magnesy molekularne. Takie podejście jest bardzo pracochłonne jeśli celem jest otrzymanie materiałów o docelowych strukturach i właściwościach.

Wyzwania naukowe:

Rozwój nowoczesnych teoretycznych metod ab-initio opisujących materiały magnetyczne może być pomocny dla chemików nieorganicznych w optymalizacji procesu syntezy. Niestety teoretyczne modelowanie materiałów magnetycznych wiąże się z wieloma wyzwaniami. Należy dokładnie opisać jak elektrony korelują w tych materiałach, jak temperatura wpływa na przejścia fazowe i właściwości magnetyczne, i jeszcze uwzględnić efekty relatywistyczne, takie jak sprzężenie spinowo-orbitalne (SOC), zwłaszcza że materiały te zwykle zawierają cięższe atomy przejściowe lub lantanowce. Metody takie jak teoria funkcjonału gęstości (DFT), które są niezwykle skuteczne w obliczeniach ciała stałego, stoją przed wieloma wyzwaniami aby dostarczyć wyników które umożliwiają przewidywanie bez uprzednich doświadczeń. Ab-initio metody chemii kwantowej, oparte na funkcji falowej, zwykle stają się zbyt kosztowne, aby można je było zastosować do ciała stałego i dużych magnesów molekularnych.

Opis proponowanych badań:

W proponowanych badaniach rozwiniemy ab-initio metody które zapewniają dokładność chemiczną i są oparte na formalizmie funkcji Greena. Będą one stosowane zarówno do magnesów molekularnych, jak i do ciała stałego. Zaprogramujemy extended atomic mean field exact two-component GW formalizm, aby dokładnie opisać efekty relatywistyczne, takie jak SOC. Bazując na tej metodzie opracujemy również podejście polegające na obliczaniu funkcji Greena przy użyciu metod o zróżnicowanej dokładności dla różnych rodzajów orbitali (ab-initio Green's function embedding methods). To podejście umożliwi nam opisać silnie skorelowane elektrony w *d*- i *f*-orbitalach w obecności SOC. Wszystkie te metody zostaną zaprogramowane w open-source programie (nazywanym GREEN), który będzie publicznie dostępny.

Te narzędzia obliczeniowe zostaną zastosowane do najnowszych materiałów altermagnetycznych, molekularnych magnesów kwantowych cechujących się silnym SOC oraz do bardziej tradycyjnych materiałów antyferromagnetycznych lub magnesów molekularnych syntetyzowanych przez naszych współpracowników.