

Streszczenie rozprawy doktorskiej

Teoretyczne badanie własności nanomagnetyków kwantowych metodą dokładnej diagonalizacji

Cel pracy stanowiło teoretyczne zbadanie własności wybranych układów magnetyków kwantowych o skończonych rozmiarach (nanomagnetyków o postaci klasterów złożonych z niewielu spinów). Założone zadanie zrealizowano modelując badane magnetyki kwantowym hamiltonianem Heisenberga dla spinów zlokalizowanych $S = 1/2$. Skupienie uwagi na spinie równym $1/2$ uzasadnione może zostać tym, iż przy najniższym spinie można spodziewać się najbardziej wyraźnych efektów kwantowych.

Opis termodynamiczny modelu opierał się na zespole kanonicznym (z uwzględnieniem pola magnetycznego w hamiltonianie). Wykorzystano metodę dokładnej diagonalizacji, która pozwala uzyskać poprawny fizycznie, wolny od artefaktów obraz, jest jednak metodą wymagającą obliczeniowo. W związku z tym badano układy o liczbie spinów nie przekraczającej 12.

Pierwszy etap pracy obejmował badania własności nanomagnetyka o kształcie skończonej drabinki spinowej złożonej z 12 spinów. Inspirację stanowiły układy syntetycznych magnetyków konstruowanych z pojedynczych atomów, mogące służyć do przechowywania informacji. Badania przeprowadzono dla szerokiego zakresu cątek wymiany. Zbadany został przede wszystkim diagram fazowy układu w stanie podstawowym oraz korelacje magnetyczne, a w skończonych temperaturach w szczególności takie wielkości termodynamiczne jak korelacje i rozkłady namagnesowania (zależność lokalnego namagnesowania od temperatury i pola magnetycznego). Kolejny etap pracy obejmował badania magnetyków molekularnych V_6 i Cu_5 , o strukturze opartej na jonach V i Cu o spinie $S = 1/2$. Zbadana została w szczególności entropia, ciepło właściwe i izotermiczna zmiana entropii. Pozwoliło to na dalsze zajęcie się tematem zjawiska magnetokalorycznego, które wzbudza znaczące zainteresowanie w układach magnetyków molekularnych.

Pracę rozpoczyna opis wspólnego formalizmu użytego w obliczeniach oraz opis stanu kwantowego układu w skończonych temperaturach i stanu podstawowego. Dalej zdefiniowane zostają poszczególne badane układy i zapisane ich hamiltoniany, wraz z odniesieniem się do wyników eksperymentalnych zawartych w literaturze, stanowiących motywację wyboru układów do badań. Kolejne części obejmują przedstawienie i omówienie otrzymanych wyników numerycznych dla obu grup badanych nanomagnetyków. Pracę zamyka podsumowanie uzyskanych rezultatów.

Pamela Kowalewska