

Własności pierścienia molekularnego Cr₈ otrzymane w oparciu o model uwzględniający elektronowe stopnie swobody i fluktuacje spinowe jonów magnetycznych

Jacek Matysiak,^(*) Romuald Lemański

Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN, Wrocław

Molekuła Cr₈F₈(O₂CH)₁₆ (w skrócie Cr₈) jest najbardziej znanym przedstawicielem szerszej rodziny pierścieni antyferromagnetycznych zbudowanych na bazie jonów chromu. Jak potwierdzają dane eksperymentalne, własności magnetyczne tej molekuly dobrze opisane są fenomenologicznym modelem uwzględniającym oddziaływania wymienne oraz wpływ pola krystalicznego [1,2]. Dotychczas, do opisu teoretycznego molekuly Cr₈ wykorzystano również obliczenia *ab initio* typu DFT, jednak wyznaczona na ich podstawie wartość sprzężenia magnetycznego dość znacznie odbiegała od tej, która została przyjęta w podejściu fenomenologicznym [3,4].

Podczas XXI Minisymposium Fizyki Statystycznej zaprezentowana zostanie próba odtworzenia własności magnetycznych molekuly Cr₈ za pomocą modelu uwzględniającego elektronowe stopnie swobody oraz fluktuacje spinowe jonów magnetycznych. Przeanalizowane będą różne warianty fluktuacji magnetycznych oraz ich wpływ na właściwości stanu podstawowego. Otrzymane wyniki zostaną porównane z danymi eksperymentalnymi oraz wynikami obliczeń opartymi na innych modelach teoretycznych.

^(*) j.matysiak@int.pan.wroc.pl

1. S. Carretta *et al.*, Phys. Rev. B **67**, 094405 (2003)
2. M. Affronte *et al.*, Phys. Rev. B **68**, 104403 (2003)
3. V. Bellini, A. Olivieri, F. Manghi, Phys. Rev. B **73**, 184431 (2006)
4. T. Ślusarski, B. Brzostowski, D. Tomecka, G. Kamieniarz, J. Nanosci. Nanotechnol. **11**, 9080 (2011)