

## **Opis teoretyczny pierścieni molekularnych uwzględniający elektronowe stopnie swobody oraz fluktuacje spinowe jonów magnetycznych**

Romuald Lemański<sup>(\*)</sup>, Jacek Matysiak

Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN, Wrocław

Zaprezentowany zostanie model, który z jednej strony odtwarza spektrum energetyczne różnych konfiguracji magnetycznych otrzymane metodą DFT i jednocześnie pozwala na uzyskanie takiej sekwencji niskoenergetycznych wzbudzeń, która jest zbliżona do otrzymanej na podstawie danych eksperymentalnych. Model ten jest uogólnieniem spinowej wersji modelu Falicova-Kimballa, w którym dołączono wyrazy odpowiadające kwantowym fluktuacjom pomiędzy różnymi konfiguracjami magnetycznymi jonów.

W referacie zostaną przedstawione przesłanki prowadzące do wyboru takiego modelu, jego związki z modelem Heisnberga, potencjalne możliwości zastosowania i rozszerzenia, jak również jego ograniczenia.

<sup>(\*)</sup> R.Lemanski@int.pan.wroc.pl