

Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **LPP-0392-09**
nanoQMC: Kvantové Monte-Carlo pre nanočastice a kvantový transport

Zodpovedný riešiteľ **prof. Ing. Ivan Štich, DrSc.**

Príjemca **FÚ SAV**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. FÚ SAV
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. North Carolina State University, Raleigh
- 2.
- 3.

Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

- 1.
- 2.
- 3.

Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

1. L. Horváthová, M. Dubecký, L. Mitas, I. Štich, Spin multiplicity and symmetry breaking in vanadium-benzene complexes, Phys. Rev. Lett. 109, 053001 (2012).
2. L. Horváthová, M. Dubecký, L. Mitas, I. Štich, Quantum Monte Carlo Study of π -bonded Transition-metal Organometallics: Neutral and Cationic Vanadium-benzene and Cobalt-benzene Half-sandwiches, J. Chem. Theor. Comput. 9, 390 (2013).
3. M. Dubecký, R. Derian, L. Horváthová, M. Allan, and I. Štich, Disentanglement of triplet and singlet states of azobenzene: Direct EELS detection and QMC modeling, Phys. Chem. Chem. Phys. 13, 20939 (2011).
- 4.

5.

Uplatnenie výsledkov projektu

Jedná sa o výsledky základného výskumu, a preto ich hlavné uplatnenie je v budovaní poznatkovej bázy. Konkrétne majú dosiahnuté výsledky dve priame uplatnenia. 1) Organometalické systémy s prechodovými kovmi s tzv. multidecker štruktúrou sa pokladali za materiály s výrazným potenciálom pre spintroniku. Ukázali sme, že tieto systémy sú feromagnetické izolanty, a nie polokovové feromagnetizanty, a preto je ich použitie v spintronike a kvantovom počítaní nepravdepodobné. Tento výsledok je úplne nový a vyvracia akceptované výsledky založené na menej presných modeloch. 2) Študovali sme aj organometalické polosendviče s prechodovými kovmi a ukázali, že menej presný DFT popis týchto systémov vedie k veľmi nízkej prediktivite magnetického stavu systému, ktorý je navyše kriticky závislý od použitého modelu výmenno-korelačného funkcionálu. Nakoľko sú tieto systémy veľmi dobrým modelom pre adsorpciu magnetických atómov na graféne, čo je jedna z najhorúcejších súčasných tém, majú tieto výsledky mimoriadny význam aj z tohto dôvodu.

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku

(max. 20 riadkov)

Ultrapresnými metódami kvantového Monte Carla (QMC) sme študovali polosendviče a plné sendviče organometalických zhlukov s prechodovými kovmi, konkrétne zhluky vanád-benzénu a kobalt-benzénu. U polosendvičov sme ukázali, že korelácia zohráva kritickú úlohu pri popise magnetického stavu polosendviča a že metódy stredovaného poľa majú mimoriadne nízku prediktivitu. Naopak, metódy QMC dosahujú pravdepodobne vyššiu presnosť, než s akou je možné viaceré veličiny (napr. disociačné energie) experimentálne merať. U plných sendvičov sme ukázali, že táto trieda materiálov sú feromagnetické izolanty, a nie polokovové feromagnetizanty, ako sa doposiaľ predpokladalo. Vlastnosť polokovu je pritom kľúčová pre použitie tejto triedy materiálov v spintronike a kvantovom počítaní. Naše závery ukazujú, že možnosť použitia týchto materiálov pre spintronické aplikácie je nepravdepodobná. Okrem hlavnej línie výskumu, popísanej vyššie sme okrajovo riešili aj problematiku excitovaných elektrónových stavov fotospínateľných molekúl (azobenzén). Spočítané singletné a tripletné excitované stavy umožnili interpretáciu EELS spektier so silne sa prekrývajúcimi singletnými a tripletnými stavmi.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku

(max. 20 riadkov)

Using ultra-accurate quantum Monte Carlo (QMC) methods we have studied half- and full-sandwiches of organometallic clusters with transition metal atoms, i.e. vanadium-benzene and cobalt benzene molecules. We have shown that electronic correlation in the half-sandwiches plays a critical role in description of their magnetic state and that mean-field methods have unusually low predictive power. Contrary, QMC methods have accuracy which may challenge experimental accuracy achievable in measuring certain properties (dissociation energies, for instance). The study of full sandwiches has shown without any doubt that these systems are ferromagnetic insulators rather than half-metal ferromagnets. The half-metal property is of key importance in application of these materials in spintronics and quantum computing. Our conclusions indicate that this class of materials is not suited for spintronics applications. As a side product we have also studied excited electronic states of photoswitchable molecules (azobenzene). Computed singlet and triplet excited states made it possible to disentangle the overlapping singlet and triplet states and interpret the experimental EELS excitation spectra.

Svojím podpisom potvrdzujem, že údaje uvedené v záverečnej karte sú pravdivé a úplné a súhlasím s ich zverejnením.

Zodpovedný riešiteľ

prof. Ing. Ivan Štich, DrSc.

V Bratislave

Štatutárny zástupca príjemcu

RNDr. Stanislav Hlaváč, CSc.

V Bratislave

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu