

Streszczenie dla ogółu społeczeństwa

Magnetyzm to szeroko rozpowszechnione zjawisko, które zajmuje ważne miejsce w naszym codziennym życiu. Materiały magnetyczne są wszechobecne, występują we wszystkich naszych urządzeniach technologicznych, a także w wielu produktach przemysłowych. Głośniki, transformatory mocy, turbiny wiatrowe, komputery i maszyny medyczne to tylko kilka przykładów rzeczy, które charakteryzują nasze życie i które nie byłyby dostępne bez magnetyzmu. Nic więc dziwnego, że wiele badań w fizyce materii skondensowanej koncentruje się na magnetyzmie, materiałach magnetycznych i ich zastosowaniach. Podczas gdy tradycyjnie najczęściej uwagi skupiano na materiałach sypkich, w ciągu ostatnich dwóch dekad intensywnie badano bardziej złożone systemy, w tym powierzchnie magnetyczne, interfejsy, cienkie warstwy, wielowarstwy, a nawet materiały dwuwymiarowe. Postępy eksperymentalne w zakresie obserwacji pojedynczych atomów i manipulowania nimi umożliwiły badanie interakcji magnetycznych bezpośrednio w skali atomowej, co otworzyło nowe perspektywy dla inżynierii magnesów jednoatomowych i nanostruktur magnetycznych.

Pomimo tych intrygujących obietnic, przełomowym eksperymentalnym postępom w syntezie, charakterystyce i manipulacji atomowej nie towarzyszył odpowiedni skok w zrozumieniu teoretycznym. Kluczowym wyzwaniem jest to, że teoretyczny opis zachowania magnetycznego wymaga rozwiązania problemów w bardzo różnych skalach długości (i czasu). Oddziaływania magnetyczne powstają w skali atomowej, więc ich opis wymaga kwantowo-mechanicznego rozwiązania wielociałowego problemu oddziałujących elektronów. Porządek magnetyczny dalekiego zasięgu pojawia się jednak na znacznie większą skalę długości, co sprawia, że bezpośrednio, kwantowo-mechaniczne podejście do całego problemu jest niewykonalne. Metody wieloskalowe stały się wówczas najnowocześniejszymi metodami opisu właściwości magnetycznych złożonych materiałów kompozytowych, choć kosztem ważnych przybliżeń.

Celem naukowym niniejszego projektu jest zbadanie roli, jaką odgrywa anizotropia sprzężenia magnetycznego w powstawaniu magnetyzmu w różnych układach opartych na pierwiastkach ziem rzadkich, od metali sypkich po adatomy na wybranych podłożach. W naszym podejściu właściwości elektronowe i magnetyczne będą badane bezpośrednio w skali atomowej, przy użyciu najnowocześniejszych metod struktury elektronowej, opartych na teorii funkcjonalu gęstości (DFT) i dynamicznej teorii średniego pola (DMFT). Kształtowanie się porządku magnetycznego w nanoskali będzie badane za pomocą symulacji atomistycznej dynamiki spinów, które wymagają jako danych wejściowych wyników innych obliczeń. To wieloskalowe podejście zapewni bardzo dokładny opis dostępnych systemów i wyjaśni samą naturę magnetyzmu ziem rzadkich. Wyniki naukowe uzyskane w ramach tego projektu nie tylko poprawią naszą wiedzę na temat kontroli sprzężenia magnetycznego bezpośrednio w skali atomowej, ale także ułatwią przejście na lepsze materiały dla spintroniki, obliczeń kwantowych i magnesów trwałych.