

TISKOVÁ ZPRÁVA

Praha 19. února 2024

Akademie věd ČR
Národní 1009/3, 110 00 Praha 1
www.avcr.cz

UNIKÁTNÍ MAGNETICKÁ NANOČÁSTICE GRAFENU VE TVARU MOTÝLA KOMBINUJE DVA KONCEPTY VZNIKU MAGNETISMU

Mezinárodnímu týmu vědců vedenému českými fyziky se poprvé podařilo vyvinout unikátní magnetický nanografen. Zkombinovali přitom dva koncepty vzniku magnetismu a jako první dokázali detekovat jejich magnetický signál pomocí pokročilé rastrovací mikroskopie a kvantově mechanických výpočtů. Grafenové nanočástice mají potenciál pro využití k uchování a zpracování informací v kvantové informatice.

Článek publikovaný dnes v časopisu [Nature Chemistry](#) popisuje inovativní postup návrhu, přípravy a ověření magnetických vlastností grafenu ve tvaru čtyř zaoblených trojúhelníků, jenž připomíná „motýlí křídla“. Na každém z nich je lokalizován jeden nepárový pí elektron, který je zodpovědný za zmíněné magnetické vlastnosti.

„Dosavadní přístupy se omezovaly na jediný magnetický původ, což limitovalo počet korelovaných spinů nebo typ magnetického uspořádání v nanografenech. V této práci se nám poprvé podařilo zkombinovat dva přístupy, které daly vzniknout tomuto unikátnímu magnetickému nanografenu se čtyřmi nepárovými elektrony. Navíc se nám podařilo díky kombinaci experimentálních a teoretických výpočtů přinést nezvratný důkaz o jeho magnetickém charakteru,“ říká Adam Matěj z Fyzikálního ústavu AV ČR a Českého institutu výzkumu a pokročilých technologií – CATRIN Univerzity Palackého v Olomouci.

Recept na přípravu nanomateriálu ze Singapuru

Nanografen syntetizovali vědci v Singapuru na povrchu zlata, když zahřáli předem připravenou organickou molekulu na 600 Kelvinů a tím došlo k dehydrogenaci a cyklizaci vazeb v jednotlivých „motýlích křídlech“. Veškerá příprava nanografenu musela probíhat v ultra vysokém vakuu, protože syntéza vysoce reaktivních látek je v roztoku problematická.

Tradiční obrázek magnetismu je spojen s přechodnými kovy, jako je například železo, které obsahuje silně prostorově lokalizované nepárové elektrony. Proto se dlouhou dobu předpokládalo, že materiály na bázi uhlíku se silně delokalizovanými elektrony nemohou mít magnetické vlastnosti.

Kontakt pro média: **Markéta Růžičková**
Divize vnějších vztahů AV ČR
press@avcr.cz
+420 777 970 812

Petra Köppl
Fyzikální ústav AV ČR
koppl@fzu.cz
+420 603 706 597

Nicméně výzkum v posledních letech ukázal nové možnosti přípravy magnetických systémů na bázi nanografenových struktur. Tento nový koncept magnetismu se kvůli přítomnosti nepárových pí elektronů nazývá pí-magnetismus. Jednou z nenaplněných výzev nové třídy magnetismu zůstávala nejen příprava nanografenů s vyšším počtem nepárových elektronů, ale také přímé experimentální ověření jejich magnetického charakteru.

Unikátní magnetické vlastnosti nanografenu ověřovali čeští vědci z týmu Pavla Jelínka z Fyzikálního ústavu AV ČR pomocí skenovací tunelovací mikroskopie, která je schopná díky sondě s molekulou niklocenu změřit lokální magnetické pole v určité části molekuly.

Teorie a experiment v silné shodě

Experimentální výsledky, jež určují elektronovou strukturu, byly potvrzeny pomocí nejmodernějších kvantově chemických výpočetních metod ve spolupráci s týmem Libora Veise z Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR.

„Výpočty elektronové struktury molekul s několika otevřenými slupkami jsou obecně velmi náročné. Již mnohokrát jsme však měli příležitost se přesvědčit, že výpočetní nástroje, které vyvíjíme, dokážou tento problém řešit s velkou přesností. Také v tomto případě si díky obrovské shodě mezi experimentálními a teoretickými výsledky můžeme být jisti závěry naší studie. Výhodou teoretických výpočtů navíc je, že často poskytují informace, které jsou experimentálně nedostupné, v tomto případě například způsob, jakým jsou jednotlivé elektronové spiny vzájemně entanglované (silně propletené),“ vysvětluje Libor Veis.

Na experimentálním a teoretickém ověření vlastností nanografenu se podíleli vědci z Národní singapurské univerzity, výzkumného ústavu CATRIN Univerzity Palackého v Olomouci, čínské Nankingské univerzity a dvou ústavů Akademie věd ČR – Fyzikálního ústavu a Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského.

Více informací:

Mgr. **Adam Matěj**, Ph.D.
Fyzikální ústav AV ČR
CATRIN, Univerzita Palackého v Olomouci
mateja@fzu.cz
+420 602 159 604

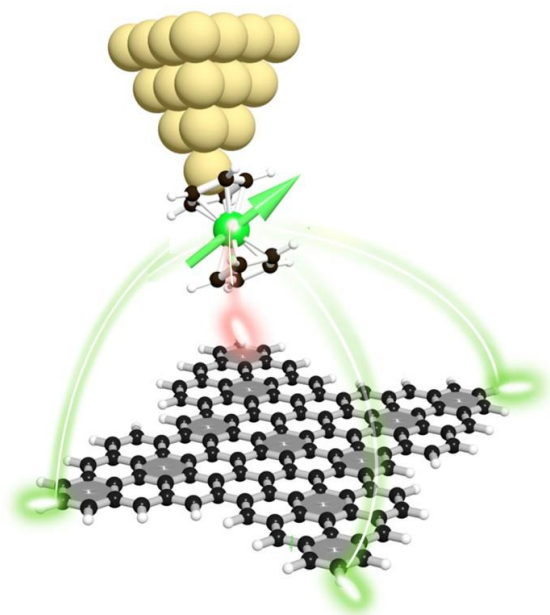
doc. Ing. **Pavel Jelínek**, Ph.D.
Fyzikální ústav AV ČR
CATRIN, Univerzita Palackého v Olomouci
jelinekp@fzu.cz
+420 734 353 740

RNDr. **Libor Veis**, Ph.D. (kontakt pouze e-mailem – pobyt v zahraničí)
Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR
libor.veis@jh-inst.cas.cz

Publikace:

doi.org/10.1038/s41557-024-01453-9
Shaotang Song, Andrés Pinar Solé, Adam Matěj, Guangwu Li, Oleksandr Stetsovych, Diego Soler, Huimin Yang, Mykola Telychko, Jing Li, Manish Kumar, Qifan Chen, Shayan Edalatmanesh, Jiri Brabec, Libor Veis, Jishan Wu, Pavel Jelínek & Jiong Lu. Highly entangled polyradical nanographene with coexisting strong correlation and topological frustration. Nature Chemistry.
<https://www.nature.com/articles/s41557-024-01453-9>

Fotogalerie



Schematický obrázek zobrazující magnetickou interakci mezi čtyřmi nepárovými elektrony nanoghrafenového "motýlku" v jeho rozích a funkcionalizovaného hrotu rastrovacího mikroskopu molekulou nickelocenu, která umožnila prokázat magnetismus nanogrfenu.

FOTO: FZÚ AV ČR