

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în anul 2025

Cifra proiectului: 25.80012.5007.85SE

Denumirea Proiectului: Materiale magnetice comutabile

REZUMAT

A fost elaborat modelul teoretic pentru descrierea transformării valent-tautomerice în compușii de cobalt cu liganzii care conțin sulf. Luând în considerare structura moleculară a cristalelor care demonstrează această transformare, se presupune că interacțiunea cooperativă dintre modele vibraționale moleculare care formează spectrul unui singur complex valent-tautomerice și modele cristaline care asigură cooperativitatea în sistem este responsabilă pentru tranziția de spin indusă de transferul sarcinii între configurațiile $low\ spin-Co^{III}(sq)(cat) \rightarrow high\ spin-Co^{II}(sq)_2$. Problema complexelor care interacționează este rezolvată prin aproximația câmpului molecular mediu. Valorile medii ale produselor matricilor electronice diagonale și coordonatelor modelor vibraționale locale pentru cele două configurații care participă la transformarea de spin joacă rolul parametrilor de ordine. Pe baza modelului elaborat este oferită o explicație cuprinzătoare a caracteristicilor magnetice observabile ale compușilor $[Co(tBu_2sq)_2(3-tnp)_2]$ și $[Co(tBu_2sq)_2(2-tnp)_2]$.

Modelul pentru descrierea transformării valent-tautomerice a fost generalizat la cazul compușilor de cobalt care posedă momentele dipolare diferite în stările $low\ spin-Co^{III}(sq)(cat)$ și $high\ spin-Co^{II}(sq)_2$. Cu acest scop, pentru compușii susnumiți, au fost incluse în model și efectele interacțiunii cooperative dipol-dipol. A fost demonstrat că aceste efecte depind de orientarea momentelor dipolare locale, precum și de aranjamentul lor spațial reciproc. Calculele efectuate demonstrează că în compusul $[Co(tBu_2sq)_2(btnp)_2]$ cuplajul dipol-dipol suprimă transformarea valent-tautomerică în întregul interval de temperaturi, și complexul rămâne în starea $low\ spin-Co^{III}(sq)(cat)$.

Cursul transformării valent-tautomerice demonstrat de complexii $[Co(tBu_2sq)_2(L)_2]$ ($L=3-tnp, 2-tnp, btnp, dtnp, pydto, CN-tnp, MeO_2C-tnp$) a fost urmat de calculele DFT ale energiilor într-un singur punct pentru diferite valori ale spinului total al acestor complexe la temperatura $T=230K$. Cu ajutorul acestor calcule a fost restabilit tabloul calitativ al conversiei de spin pentru acești compuși și, pe această bază, a fost oferită o explicație calitativă a diferenței în comportamentul lor magnetic.

Conducătorul de proiect Prof. cerc., Dr.hab. Sofia CLOCHIȘNER
(numele, prenumele)

Data: 03.12.2025

LȘ

Clochișner
(semnătura)

