**"W kierunku lepszych magnesów molekularnych". Korelacja struktury**

**i anizotropii magnetycznej"**

***Alina Bieńko***

Obszar moich zainteresowań naukowych, będący próbą odpowiedzi na wyzwania współczesnej nauki, dotyczy projektowania, syntezy i badań fizykochemicznych nowych molekularnych materiałów magnetycznych o możliwie najwyższych temperaturach przejścia do stanu uporządkowania magnetycznego dalekiego zasięgu. Materiały te znane są jako magnesy cząsteczkowe (SMM), magnetyczne nanodruty molekularne (SCM) czy też pojedyncze jony magnetyczne (SIM).

Przeprowadzone w ostatnich latach badania teoretyczne i eksperymentalne pozwoliły na ustalenie właściwości gwarantujących zachowania typu SMM czy SIM, którymi są: wysoki stan spinowy S, duża osiowa („easy-axis”) anizotropia magnetyczna (D), a także powstawanie znacznej bariery energetycznej (rosnącej z S i D) uniemożliwiającej odwrócenie namagnesowania. Właściwości te prowadzą do bistabilnych układów, o tym większym czasie relaksacji im wyższa jest bariera energetyczna. Obok parametru g, najlepszą metodą wyznaczania parametru D zarówno lokalnego jak wymiennego są pomiary EPR. Korelacja wyników badań magnetycznych ze strukturą krystaliczną i molekularną jest podstawą sterowania syntezy i właściwości otrzymywanych materiałów magnetycznych, oraz zapewnia zmianę magnetycznej anizotropii w wyniku racjonalnych zmian anizotropii strukturalnej. Osiągnięcie dużej wartości D wymaga jednak zrozumienia, w jaki sposób dostosować geometrię związku tak aby uzyskać znaczący udział sprzężenia spinowo-orbitalnego w anizotropii magnetycznej. Wyniki naszych badań przeprowadzonych dla serii otrzymanych kompleksów Co(II) z tridentnym ligandem 2,6-bis (pirazol-1-ilo) pirydyną (pypz), jej pochodnymi i halogenkowymi lub pseudohalogenkowymi ligandami pokazują, że modulowanie geometrii układu jest możliwe poprzez modyfikację czynników strukturalnych: wymiana podstawnika w ligandzie, zaburzenie siły pola ligandów, wprowadzenie ligandów anionowych. Obecność wysokiej anizotropii magnetycznej wpływającej na znaczny wzrost bariery energetycznej w badanych materiałach została dodatkowo potwierdzona wysokopolowymi badaniami EPR (HFEPR) w zakresie częstości 100650 GHz wspomaganymi, ze względu na duże rozszczepienie poziomów energetycznych, nowatorską metodą FIRMS (Far-Infrared Magnetic Spectroscopy) polegającą na przemiataniu częstotliwościami terahercowymi i pomiarze absorpcji promieniowania jako funkcji częstotliwości. Nasze badania pokazują również, że nie tylko ujemny znak parametru D nie jest warunkiem koniecznym do obserwowania procesów relaksacji, ale również brak efektu zfs lub wysoki spin stanu podstawowego. Przykładem jest wykrycie przez nas procesów powolnej relaksacji indukowanej słabym, zewnętrznym polem magnetycznym w kompleksach Cu(II) i Cr(III).

Projektowanie materiałów nowej generacji powinno zakładać nie tylko ich oczekiwane zachowania w polu magnetycznym, ale także łączenie kilku zastosowań, prowadząc do materiałów wielofunkcyjnych. Jedną z takich funkcji może być aktywność biologiczna - przeciwnowotworowa, czy też przeciwbakteryjna. Dla takich potencjalnych terapeutyków superparamagnetyczne właściwości układów mogą być wykorzystywane do projektowania dróg ich selektywnego transportu. Stąd też kolejny z kierunków badawczych realizowany w kierowanym przeze mnie Zespole Materiałów Magnetycznych dotyczy syntezy nowych materiałów opartych na fosfinowych koniugatach biologicznie aktywnych amin, aminokwasów oraz peptydów oraz ich kompleksowych połączeniach z jonami metali (Rh, Ir, Cu na wybranych stopniach utlenienia). Najbardziej obiecujące układy pod względem aktywności przeciwnowotworowej in vitro są zamykane w specjalnie zaprojektowane struktury (micele i liposomy) wzbogacane superparamagnetycznymi nanocząsteczkami Fe3O4 (o precyzyjnie dobranej wielkości ziaren) umożliwiając tym samym bezpośrednie doprowadzenie cytostatyka do nowotworu za pomocą słabego pola magnetycznego.