

Press release**Technische Universität Graz****Philipp Jarke**

06/11/2024

<http://idw-online.de/en/news835042>Research results
Chemistry, Physics / astronomy
transregional, national**Schalten von Nanomagnetten durch Infrarotlaser****Physiker der TU Graz haben berechnet, wie sich geeignete Moleküle durch Infrarot-Lichtimpulse zur Bildung winziger Magnetfelder anregen lassen. Gelingt dies auch im Experiment, könnte das Prinzip in Schaltkreisen von Quantencomputern zur Anwendung kommen.**

Werden Moleküle mit Infrarotlicht bestrahlt, fangen sie durch die Energiezufuhr an zu schwingen. Für Andreas Hauser vom Institut für Experimentalphysik der TU Graz war dieses bekannte Phänomen Ausgangspunkt zu Überlegungen, ob sich mithilfe dieser Schwingungen auch Magnetfelder erzeugen lassen: Denn Atomkerne sind positiv geladen, und bewegt sich ein geladenes Teilchen, entsteht ein Magnetfeld. Am Beispiel von Metall-Phthalocyaninen – ringförmigen, planaren Farbstoffmolekülen – haben Andreas Hauser und sein Team nun berechnet, dass diese Moleküle aufgrund ihrer hohen Symmetrie tatsächlich winzige Magnetfelder im Nanometerbereich erzeugen, wenn Infrarotimpulse auf sie einwirken. Eine Vermessung der recht geringen, aber sehr präzise lokalisierten Feldstärke sollte den Berechnungen zufolge mittels Kernspinresonanzspektroskopie möglich sein. Ihre Ergebnisse haben die Forschenden im Journal of the American Chemical Society veröffentlicht.

Kreistanz der Moleküle

Für die Berechnungen griff das Team auf zum Teil jahrzehntealte Vorarbeiten aus der Anfangszeit der Laserspektroskopie zurück und berechnete mittels moderner Elektronenstrukturtheorie auf Supercomputern des Vienna Scientific Cluster und der TU Graz, wie sich Phthalocyanin-Moleküle bei Bestrahlung mit zirkular polarisiertem Infrarotlicht verhalten. Das Ergebnis: Die zirkular polarisierten, also schraubenförmig verdrehten, Lichtwellen versetzen das Molekül in zwei gleichzeitige Vibrationen, die im rechten Winkel zueinander stehen. „Aus der richtigen Kombination von Vorwärts-Rückwärts und Links-Rechts wird, wie jedes Rumba-Tanzpaar weiß, eine kleine, in sich geschlossene Schleife. Und durch diese kreisförmige Bewegung jedes betroffenen Atomkerns entsteht tatsächlich ein Magnetfeld, allerdings nur sehr lokal, mit Abmessungen im Bereich weniger Nanometer“, sagt Andreas Hauser.

Moleküle als Schaltkreise in Quantencomputern

Durch gezielte Manipulation des Infrarotlichts lässt sich sogar die Stärke und die Richtung des Magnetfeldes steuern, erklärt Andreas Hauser weiter. Dadurch würden die Moleküle zu hochpräzisen optischen Schaltern, aus denen sich potenziell auch Schaltkreise eines Quantencomputers aufbauen lassen.

Experimente als nächster Schritt

Mit Kolleg*innen vom Institut für Festkörperphysik der TU Graz und einem Team an der Universität Graz möchte Andreas Hauser nun auch experimentell nachweisen, dass sich molekulare Magnetfelder kontrolliert erzeugen lassen. „Für diesen Nachweis, aber auch für zukünftige Anwendungen, muss das Phthalocyanin-Molekül auf eine Oberfläche aufgebracht werden. Dadurch verändern sich jedoch die physikalischen Rahmenbedingungen, was wiederum die

lichtinduzierte Anregung und die Ausprägung des Magnetfelds beeinflusst“, erklärt Andreas Hauser. „Wir wollen daher ein Trägermaterial finden, das nur wenig Einfluss auf diese Effekte hat.“ Die Wechselwirkungen zwischen den Phthalocyaninen, dem Trägermaterial und dem Infrarotlicht werden Andreas Hauser und seine Kolleg*innen zunächst wieder auf Supercomputern simulieren, bevor die vielversprechendsten Varianten im Experiment auf die Probe gestellt werden.

contact for scientific information:

Andreas HAUSER
Assoc.Prof. Mag.phil. Dipl.-Ing. Dr.phil. Dr.techn.
TU Graz | Institut für Experimentalphysik
Tel.: +43 316 873 8157
andreas.hauser@tugraz.at

Original publication:

Molecular Pseudorotation in Phthalocyanines as a Tool for Magnetic Field Control at the Nanoscale
Journal of the American Chemical Society, 14. Mai 2024

Autoren:

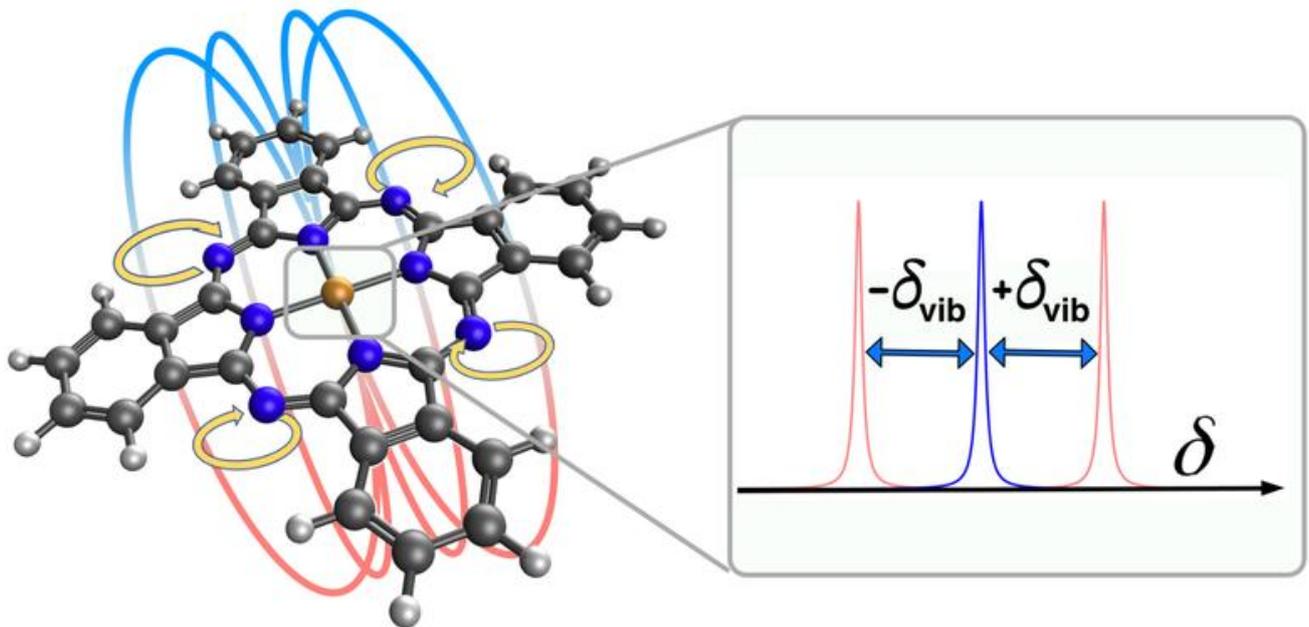
Raphael Wilhelmer, Matthias Diez, Johannes K. Krondorfer und Andreas W. Hauser

DOI: <https://doi.org/10.1021/jacs.4c01915>

URL for press release: <https://www.tugraz.at/forschung/fields-of-expertise/advanced-materials-science/ueberblick-advanced-materials-science> Diese Forschung wird vom Österreichischen Wissenschaftsfond gefördert und ist im Field of Expertise „Advanced Materials Science“ verankert, einem von fünf strategischen Schwerpunktfeldern der TU Graz.



Andreas Hauser vom Institut für Experimentalphysik der TU Graz.
Helmut Lunghammer
Lunghammer - TU Graz



Schematische Darstellung eines Metall-Phthalocyanin-Moleküls, das in zwei Schwingungen versetzt wird, wodurch ein rotierendes, elektrisches Dipolmoment in der Molekülebene und damit ein Magnetfeld entsteht.
Wilhelmer/Diez/Krondorfer/Hauser - TU Graz