

Materiały o dwuwymiarowej strukturze (z jedną warstwą atomów) przyciągają często uwagę naukowców w ostatnich latach. Można zauważyć wiele praktycznych zastosowań grafenu, nanorurek w różnych dziedzinach, począwszy od elektroniki, a skończywszy na budownictwie (np. beton z domieszką nanorurek). Materiały oparte na węglu są dobrze znane i znalazły wiele zastosowań, lecz istnieją również inne pierwiastki, które mogą zostać zastosowane do wytwarzania struktur dwuwymiarowych, takie jak molibden, jego związki np. disiarczki molibdenu (MoS_2), tungsten diselenidu (WSe_2) i inne. Znane są stabilne konfiguracje atomowe tych materiałów, lecz jedynie dla typowych konfiguracji atomowych.

Celem projektu jest opracowanie metod inteligentnego projektowania nowych materiałów dwuwymiarowych posiadających stabilną konfigurację oraz zadane własności oparte na molibdenie. W ramach projektu planowane jest zarówno opracowanie metody jak również oprogramowania, które pozwoli na weryfikację metody oraz opracowanie nowych stabilnych struktur o zadanych własnościach (np. ortotropowych mechanicznych, cieplnych).

Optymalizacja struktur dwuwymiarowych, określenie położenia atomów w komórce periodycznej struktury opartej na molibdenie może zostać przeprowadzona z użyciem bioinspirowanych metod optymalizacji oraz symulacji na poziomie molekularnym. Zastosowane algorytmy optymalizacji muszą być odporne na utykanie w minimach lokalnych funkcji celu oraz jednocześnie umożliwić określenie precyzyjnej wartości optimum. Takie kryteria spełniają algorytmy memetyczne nazywane często hybrydowymi. Wartość funkcji celu uzależniana jest od wartości energii lub też od predefiniowanych własności materiałowych nanostruktury. Wartość funkcji celu może zostać określona na podstawie symulacji numerycznych struktury atomowej. Symulacje w skali atomowej muszą być jak najbardziej zbliżone do warunków rzeczywistych, dlatego istotne jest użycie odpowiednich modeli, a w szczególności odpowiednich oddziaływań międzyatomowych.

W projekcie używane będą metody *ab initio*, statyka oraz dynamika molekularna. Na bazie wyników otrzymanych z użyciem powyższych metod symulacji numerycznej obliczana będzie wartość funkcji celu.

Nanostruktury oparte na węglu (C) oraz molibdenie (Mo) można rozpatrywać jako alternatywne, chociaż grafen był do tej pory o wiele częściej badany materiałem niż nanostruktury oparte na molibdenie. Podczas prac porównujących własności materiałów dwuwymiarowych, stwierdzono, że grafen można potraktować jako wierzchołek góry lodowej, podczas gdy pozostałe materiały dwuwymiarowe okazują się resztą tej góry.