

W ostatnich latach dużą uwagę naukowców przyciąga badanie własności fizycznych nowoczesnych materiałów, które mogą być wykorzystane do produkcji urządzeń przeznaczonych do ultraszybkiego zapisu i odczytu informacji. Bardzo popularna stała się również synteza funkcjonalnych materiałów nowoczesnych technologii do zastosowań elektronicznych czy medycznych. Jednak proces tworzenia tych materiałów oraz optymalizacja ich właściwości w pożądanym kierunku jest niejednokrotnie bardzo kosztowna i niekiedy nieefektywna bez wskazówek pochodzących z rozważań teoretycznych. W związku z tym proces projektowania nowych materiałów oraz wstępny etap ich syntezy powinien być uzupełniony, a niekiedy być może zastąpiony symulacjami komputerowymi ich struktury i własności fizycznych.

Celem niniejszego projektu jest stworzenie metodologii obliczeń używanych do badania własności fizycznych chalcogenidkowych materiałów półprzewodnikowych w oparciu o metody chemii kwantowej, ponieważ do chwili obecnej nie udało się poprawnie policzyć własności elektronowych tych materiałów. Przeprowadzenie wstępnych badań z wykorzystaniem symulacji komputerowych i metod chemii kwantowej polepszy wiedzę na temat własności fizycznych badanych materiałów bez znaczących kosztów finansowych. Pozwoli również przewidzieć własności materiałów jeszcze nieistniejących i będzie pomocny w projektowaniu materiałów funkcjonalnych. Proponowane badania będą prowadzone dla grupy materiałów zdefiniowanych jako $X_n(PY_3)_m$ ($X=Sn, Mn, Pb, Y=S, Se; n, m=1,2$), które następnie będą mogły być uogólnione na szerszą gamę materiałów półprzewodnikowych o systemie silnie skorelowanych elektronów. Prowadzenie obliczeń własności elektronowych, optycznych, magnetycznych, a także drgań wibracyjnych kryształów $X_n(PY_3)_m$ na gruncie pierwszych zasad da narzędzia do badania różnych właściwościach fizycznych całych rodzin materiałów półprzewodnikowych. Da to również możliwość wyjaśnienia problemu polaryzacji domen elektrycznych w elementach pamięci komputerowych lub innych elementach do zapisu i przechowywania danych. Zrozumienie wpływu niestechiometrii, obecności wakansów i defektów oraz ograniczenia rozmiarowego materiału jak również jego miniaturyzacji pomoże przewidzieć własności nowych materiałów projektowanych poprzez modyfikację materiałów już istniejących. Da to nowe pomysły dotyczące produkcji zaawansowanych materiałów stosowanych np. w pamięciach FRAM. Przewidywania teoretyczne własności fizycznych nowych materiałów, ukierunkowanie ich modyfikacje i eksperymentalne sprawdzenie tychże parametrów fizycznych da możliwość poprawy technologii syntezy materiałów ferroelektrycznych. Wiedza o konstrukcji tych materiałów, ich produkcja i charakterystyka będzie dawała możliwości opracowanie nowych technologii aplikacyjnych w procesie szybkiego zapisu i przechowywania danych. Da to również możliwość syntezy materiałów stosowanych w mezelektronice, nowej gałęzi technologii elektronicznej dającej rozwiązana aplikacyjne ograniczające problem nadmiernego zużycia energii.