



## POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU:

*Teoretyczne badania własności strukturalnych, elektronowych, magnetycznych i optycznych heterostruktur van der Waalsa składających się z warstwowych materiałów dwuwymiarowych.*

Heterostruktury vdW to zupełnie nowe materiały składające się z intensywnie badanych ostatnio struktur dwuwymiarowych (2D). Grafen to najbardziej znany przedstawiciel materiałów 2D, do których należą m.in. popularny ostatnio heksagonalny azotek bory BN, silicen, czy disiarczek molibdenu MoS<sub>2</sub>. Gdyby tak połączyć te materiały jak klocki lego, na różne sposoby, to istnieje praktycznie nieograniczona liczba możliwych heterostruktur, a dowolność ich łączenia wynika z natury oddziaływań poszczególnych warstw ze sobą. Słabe siły van der Waalsa umożliwiają dowolne konfiguracje materiałów 2D tworzących te heterostruktury. Co więcej wstępne badania pokazały, że heterostruktury vdW posiadają niezwykle właściwości materiałów 2D je tworzących, jak i zupełnie nowe właściwości fizyko-chemiczne, otwierając drzwi dla projektowania nowej generacji wielofunkcyjnych urządzeń ważnych dla dalszego rozwoju cywilizacji. Z tego punktu widzenia, badania tych materiałów są niezwykle istotne. Jak dotąd, nie wiele z nich udało się zsyntetyzować, co więcej w praktyce systematycznie badania doświadczalne potencjalnie ciekawych heterostruktur są niemożliwe, z uwagi iż każda heterostruktura wymaga innej metody syntezy, co jest kosztowne i czasochłonne. Dzięki wzrastającej mocy superkomputerów, jak i postępowi w dziedzinie modelowania nanomateriałów, systematyczne badania teoretyczne wydają się być uzasadnione. Stąd, wyłania się ogólny cel tego projektu, który stanowi przeprowadzenie zaawansowanych rachunków *ab initio* dużej liczby heterostruktur, w celu wskazania najlepszych kandydatów posiadających pożądane funkcjonalności z punktu widzenia elektroniki, spintroniki, czy optoelektroniki. Warsztatem teoretycznym prowadzonych badań, będą obliczenia z pierwszych zasad oparte o Teorię Funkcjonałów Gęstości (DFT), która jest obecnie uważana za jedną z najdokładniejszych metod wyznaczania stabilności nanomateriałów, jak i ich struktury elektronowej. Jak wiadomo, standardowe podejście metody DFT nie uwzględnia słabych sił typu van der Waalsa, które ogrywają istotną rolę dla tych materiałów. Stąd, metody wykraczające poza standardowe podejście DFT będą użyte, takie jak metoda oparta na przybliżeniu przypadkowych faz (RPA), wraz z metodą opartą na dokładnej wymianie (EXX). Prowadzone badania dadzą istotny wgląd w fizyczne mechanizmy rządzącymi tymi materiałami, jak i pozwolą ustalić trendy chemiczne badanych heterostruktur, co w konsekwencji może przyczynić się do projektowania nowej generacji wielofunkcyjnych urządzeń. Co więcej, planowane badania mają fundamentalne znaczenie z punktu widzenia zapotrzebowania energetycznego, bowiem heterostruktury vdW mogą stanowić skuteczne konwertery energii, czy urządzenia niskoenergetyczne.