

Nanodrutu metaliczne i półprzewodnikowe są postrzegane jako naturalne elementy do konstruowania elektroniki w nanoskali. Ostatnie badania wykazały, że nanodrutu (NWs, nanowires) mogą pełnić wiele różnorodnych funkcji. Mogą np. być domieszkowane, aby służyć jako komponenty aktywne, a jednocześnie jako nanozłącza. Z uwagi na szybki postęp w kontrolowanym wytwarzaniu cienkich nanodrutów, techniki eksperymentalne często osiągnęły granicę, przy której są one niewystarczające do uzyskania dokładnej znajomości struktury atomowej. Jednakże, niezależnie od wybranego materiału, to właśnie struktura cienkiego nanodrutu jest najważniejszym czynnikiem, który decyduje o jego własnościach elektronowych, magnetycznych oraz elastycznych, a tym samym gwarantuje celowość intensywnych badań teoretycznych.

Celem tego projektu jest znalezienie struktury nanodrutów z boru i jego pochodnych o średnicach do 3 nm. Interesować nas będą własności elektronowe, magnetyczne i elastyczne tych nanodrutów w funkcji ich średnicy. W szczególności zbadamy (i) nanodrutu borowe „czyste” i pasywowane atomami wodoru, (ii) nanodrutu ze stopów i związków podwójnych oraz 1D heterostruktury, (iii) wreszcie domieszkowane metalami (np. Mg) nanodrutu borowe. Aby osiągnąć nasz cel przyjmujemy założenie, że zagadnienie poszukiwania struktury cienkich nanodrutów jest problemem optymalizacji globalnej i zajmujemy się nim jako takim za pomocą wyszukiwania opartego na algorytmach ewolucyjnych (EAs, evolutionary algorithms) w połączeniu z obliczeniami opartymi o teorię funkcjonału gęstości (DFT, density functional theory).

Wybór boru [1], jako materiału na którym zbudujemy metodologię opartą na EAs poszukiwania struktury nanodrutów, nie jest przypadkowy. Jest to pierwiastek, który obok węgla, ma bardzo bogatą chemię, a co za tym idzie występuje w wielu formach alotropowych. Eksperymentalnie zostało potwierdzone istnienie jego 5-iu objętościowych form alotropowych, a badania teoretyczne donoszą o 14-tu. Jest więc dość naturalnym spodziewanie się, że również w jednym wymiarze bor może posiadać wiele form, które nie zostały dotychczas odkryte.

[1] N. S. Hosmane, *Boron Science: New Technologies and Applications* (CRC Press, 2016).