

## POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU

Odkrycie grafenu w 2004 r. otworzyło całkiem nowy rozdział w badaniach materiałowych. Niezwykłe właściwości którymi się charakteryzuje, np. prędkość, z jaką mogą poruszać się w nim elektrony pobudza nieustająco zainteresowanie badaczy i inżynierów urządzeń. Zaczęto się zastanawiać jak jeszcze można ulepszyć tę pojedynczą warstwę grafitu, by nadać jej pożądane cechy do zastosowań w dziedzinach takich jak elektronika, fotonika, projektowanie elastycznych urządzeń, sensorów, superkondensatorów, lub medycynie. Jedną z podstawowych technik, która służy modyfikacji właściwości materiałów jest wprowadzenie atomów innego typu (domieszkowanie). Grafen, jako zbudowany z węgla, najłatwiej domieszkować borem i azotem – jego najbliższymi sąsiadami w układzie okresowym. Takie właśnie układy – dwuwymiarowe stopy zawierające węgiel (C), bor (B) i azot (N) są przedmiotem badań w obecnym projekcie. **Podstawowym celem projektu jest zrozumienie fizykochemicznych mechanizmów wpływających na strukturę, stabilność, własności wynikające z koncentracji i rozmieszczenia atomów boru i/lub azotu w sieci grafenowej.** Budując teorię do opisu takich stopów C-B-N musimy jednak stawić czoła pewnym wyzwaniom, m.in:

- (i) zazwyczaj w strukturach tego typu obserwuje się **nieuporządkowanie** tzn. domieszki nie są rozłożone równomiernie w materiale,
- (ii) materiały nie są idealne, lecz posiadają różne defekty,
- (iii) brzegi takiej płaskiej struktury grafenowej również modyfikują własności materiału.

W ramach projektu chcemy wykazać, że **dobierając odpowiednio koncentracje atomów tworzących jednowarstwowe stopy C-B-N o strukturze heksagonalnej, oraz poprzez dołączanie do powierzchni małych molekuł możemy uzyskać materiały o nowych, odmiennych od znanych obecnie własnościach, które znajdą następnie zastosowanie do budowy nowej generacji urządzeń.**

W tym celu stworzony zostanie program do symulacji, w którym w nowatorski sposób połączymy i zaadaptujemy metody dobrze znane w dziedzinie ciała stałego (metody empirycznego obliczania energii, jej optymalizacja metodą Monte Carlo, wyznaczanie struktury elektronowej). Pozwoli to na dokładne obliczenia właściwości materiałów w dużych strukturach, co jest niezwykle ważne w stopach C-B-N, gdzie występujący nieporządek stanowi jedną z kluczowych cech materiału.

Zastosowany schemat obliczeniowy da nam narzędzie do **zrozumienia właściwości dwuwymiarowych stopów C-B-N ze szczególnym uwzględnieniem uporządkowania w tych strukturach.** Program komputerowy rozwijany w trakcie badań będzie mógł być, po niewielkich modyfikacjach, zastosowany do obliczeń innych dwuwymiarowych materiałów, które są równie obiecujące (np. fosforen, silicen, germanen, chalkogenki metali przejściowych, dwuwymiarowe tlenki).

Ponadto, wiedza zgromadzona podczas realizacji projektu będzie przyczynkiem do rozwiązania dwóch niezwykle ważnych problemów współczesnego społeczeństwa: sekwestracji dwutlenku węgla i przechowywania energii.