

Nanostruktury zawierające metale przejściowe posiadają bardzo ciekawe własności z punktu widzenia badań podstawowych oraz ogromny potencjał aplikacyjny. Przykładem nanostruktur, które mogą zostać wykorzystane w nanotechnologii, są omawiane w tym projekcie związki żelaza z krzemem. Układy te położone na odpowiedniej powierzchni potrafią samoorganizować się w formie uporządkowanych nanostruktur typu klastrów i nanodrutów. Ze względu na duże przewodnictwo elektryczne i dużą stabilność chemiczną materiały te mogą być wykorzystane do tworzenia połączeń elektrycznych w nowych urządzeniach elektronicznych, a ich własności magnetyczne powodują, że mogą być użyte w spintronice. Zmniejszona wymiarowość układów może mieć także istotny wpływ na własności nadprzewodzące, czego przykładem jest monowarstwa FeSe na podłożu SrTiO₃. Znaczny wzrost temperatury krytycznej przejścia do fazy nadprzewodzącej daje możliwość technologicznego wykorzystania tego układu. Duże znaczenie badanych układów w nanotechnologii powoduje iż bardzo ważne stało się opracowanie teoretycznego opisu omawianych struktur. Posiadanie modeli teoretycznych umożliwia zbadanie nowych zjawisk takich jak niekonwencjonalne nadprzewodnictwo w materiałach z żelazem.

Przy tak dużej miniaturyzacji ważną rolę zaczynają odgrywać, nie do końca poznane, efekty związane z rozmiarem układu. Główne problemy z jakimi się spotykamy to stabilność układów na zmiany temperatury, skuteczne odprowadzanie ciepła i silna modyfikacja własności elastycznych, które determinują wytrzymałość materiału na odkształcenia. Wszystkie wymienione własności powiązane są bezpośrednio ze sposobem w jakim poszczególne atomy poruszają się w kryształach i energiami takich ruchów.

Celem niniejszego projektu jest przeprowadzenie kompleksowych badań własności strukturalnych i dynamicznych wybranej grupy nanomateriałów i powiązanie ich z innymi własnościami materiałowymi przy użyciu metod teoretycznych i eksperymentalnych. Nasza grupa badawcza z Instytutu Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk w Krakowie specjalizuje się w obliczeniach własności materiałowych stosując tzw. metody z pierwszych zasad, oparte na podstawowych prawach mechaniki kwantowej i fizyki statystycznej. Umiejętności zdobyte w dotychczasowych badaniach i posiadane oprogramowanie komputerowe umożliwia precyzyjne wyznaczenie podstawowych charakterystyk, takich jak parametry sieci krystalicznej, strukturę elektronową, momenty magnetyczne i własności dynamiczne badanych materiałów. Nawet najbardziej zaawansowane metody obliczeniowe wymagają jednak weryfikacji przy pomocy odpowiednich eksperymentów, które z kolei potrzebują opisu teoretycznego do właściwej interpretacji wyników pomiarowych. W ramach projektu wykorzystamy wyniki pomiarów uzyskane w Europejskim Centrum Badań Synchrotronowych (ESRF) w Grenoble, w Niemieckim Synchrotronie Elektronowym (DESY) w Hamburgu, oraz przy pomocy nowej techniki ultraszybkiej spektroskopii optycznej i aparatury pomiarowej opracowanej na Politechnice w Lozannie (EPFL). Próbkę do pomiarów będą przygotowywane na bieżąco w trakcie eksperymentu (*in situ*) przez grupę z Instytutu Technologicznego w Karlsruhe. Taka ścisła współpraca między naszymi grupami jest warunkiem koniecznym przeprowadzenia badań nad złożonymi nanostrukturami i osiągnięcia zamierzonego celu badawczego, którym jest rozszerzenie wiedzy i głębsze zrozumienie własności badanych materiałów. W przyszłości materiały te mogą zostać wykorzystane do stworzenia nowej generacji urządzeń nanotechnologicznych.