

Dwu-wymiarowe (2D) materiały są krystalicznymi strukturami złożonymi z pojedynczej warstwy, lub kilku warstw atomów lub związków chemicznych. Niezwykle własności dwu-wymiarowych materiałów otworzyły nowe możliwości naukowcom i inżynierom dominującą dzisiejszą naukę o nano-materiałach. Obecnie najczęściej badanymi materiałami 2D są grafen i jego pochodne, jak również zyskujące na popularności dichalkogenki metali przejściowych (TMDC), takie jak na przykład MoS_2 . Ogólnie, materiały 2D można klasyfikować jako elementarne, związki i heterostruktury van der Waalsa. Ostatnio pojawiła się interesująca grupa nowych materiałów 2D, mianowicie warstwowe karbidki, azotki, oraz karbo-azotki metali przejściowych, tak zwane **MXenes**. Podstawowe struktury MXenes składają się z naprzemiennych warstw metalu przejściowego (TM) oraz węgla lub azotu C (N), na przykład, TX-X-TM czy TM-X-TM-X-TM, opisane formułą chemiczną TM_2X oraz TM_3X_2 , gdzie X = C lub N. Rodzina materiałów MXenes powiększa się szybko od odkrycia Ti_3C_2 w roku 2011. Wstępne badania MXenes wyraźnie wskazują, że te materiały mogą okazać się przełomowe w wielu dziedzinach nauki o materiałach, chemii i fizyki. Ale w chwili obecnej zrozumienie własności tych materiałów i procesów w nich zachodzących jest daleko niekompletne.

Głównym założeniem tego projektu jest dostarczenie głębokiego zrozumienia fizykochemii nowej rodziny niedawno odkrytych i tylko słabo eksplorowanych materiałów MXenes, a następnie przy pomocy *wspomaganego eksperymentalnie komputerowego projektowania materiałów* zdefiniowanie funkcjonalnych nanostruktur, które mogłyby zostać zastosowane w nowej generacji urządzeń na polu **plazmoniki, spintroniki, termo-elektryczności**. Przy pomocy *wspomaganego eksperymentalnie modelowania*, zamierzamy potwierdzić najważniejsze **hipotezy badawcze projektu**: (i) MXenes mogą być bardzo dobrymi materiałami dla plazmoniki i przewyższać inne do tej pory rozważane materiały 2D w tej dziedzinie, (ii) MXenes tworzą rodzinę materiałów o bardzo dobrych własnościach termoelektrycznych, szczególnie dla zastosowań wysokotemperaturowych, oraz (iii) poprzez właściwą funkcjonalizację można z jednego materiału MXenes otrzymać strukturę o własnościach półprzewodnikowych, jak również wykazującą ferromagnetyzm o temperaturze Curie przewyższającej temperaturę pokojową. Ta cecha MXenes pozwoli na zbudowanie spinowego tranzystora polowego (Spin FET) całkowicie na bazie jednego materiału.

Metodologia zastosowana dla wykazania postawionych hipotez badawczych i zrealizowania założonego celu projektu będzie opierała się na zastosowaniu narzędzi wielkoskalowego modelowania dostarczających wiarygodnych ilościowych przewidywań dla realnych układów dostępnych technologicznie, zwykle niedoskonałych i wykazujących pewien stopień nieuporządkowania, a nie tylko dla 'idealnych' całkowicie uporządkowanych struktur badanych dotychczas. Zrealizowanie takiego narzędzia modelowania będzie wspomaganie przez ścisłą współpracę z grupą doświadczalną. Synergia pomiędzy badaniami teoretycznymi i eksperymentalnymi powinna dostarczyć opłacalny schemat badawczy, który zaowocuje nowymi i ważnymi rezultatami. Opracowany schemat obliczeniowy na poziomie atomistycznym dostarczy wiarygodnych ilościowych przewidywań dla stabilności rozważanych struktur, równowagowej morfologii i geometrii, elektronowych, optycznych i magnetycznych własności, oraz równocześnie pozwoli na obliczenia ładunkowego, spinowego i cieplnego transportu w funkcjonalizowanych strukturach MXenes zawierających setki tysięcy atomów. Stworzone narzędzie modelowania musi uwzględniać następujące czynniki fizyczne i chemiczne, które określają własności struktur opartych o MXenes: (i) kształt płaskich i wygiętych płatków, (ii) efekty brzegów, (iii) wewnętrzne defekty strukturalne, (iv) atomy i molekuly będące pozostałościami po procesach technologicznych otrzymywania MXenes, F, O, OH najczęściej przypadkowo rozłożone na powierzchni, (v) możliwość istnienia struktur stopowych, (vi) intencyjnie wprowadzone na powierzchnię atomy i molekuly funkcjonalizujące układ, oraz (vii) zewnętrzne pola elektryczne i magnetyczne. Ścisła współpraca z grupą doświadczalną pozwoli na bieżące ewaluowanie narzędzia modelowania, określenie wiarygodności przewidywań, oraz subtelne udoskonalanie i strojenie modelu.

Opracowanie takiego schematu modelowania będzie stanowiło duże osiągnięcie w obliczeniowej nanonauce i teorii materii skondensowanej, a opracowana metodyka znajdzie zastosowanie do badania innej grupy materiałów w przyszłości. Mamy świadomość, że hipoteza dotycząca tranzystora spinowego jest badaniem typu *wysokie ryzyko – wysoka nagroda*. Pomimo dużych wysiłków badawczych zainwestowanych w problem tranzystora spinowego, żadnej grupie badawczej nie udało się zbudować działającego urządzenia bazującego na jednym materiale, a urządzenia hybrydowe są bardzo nieefektywne.

Realizacja projektu dostarczy rozwiązań nowych i ważnych problemów, dając znaczący wkład do fizyki, chemii i nauki o materiałach. W dodatku propozycje nowych funkcjonalnych struktur dla plazmoniki i termo-elektryczności, oraz wskazanie nowej opcji dla realizacji tranzystora spinowego, powodują, że projekt wniesie wkład do problemów gromadzenia i konwersji energii oraz przyszłościowej nanoelektroniki, czyli do zagadnień, które są niezwykle ważne dla rozwoju naszej cywilizacji.