

## 1. Cel badań

Celem projektu są badania teoretyczne i doświadczalne podstawowych własności zaawansowanych materiałów niskowymiarowych a mianowicie heterostruktur van der Waalsa monochalkogenków metali przejściowych IV grupy (TMMC), takich jak GeS, GeSe, SnS oraz SnSe. Struktury kilku-, dwu- i monowarstwowe tych związków stanowią nową klasę dwuwymiarowych (2D) materiałów półprzewodnikowych.

Głównym wyzwaniem projektu są pionierskie, zaawansowane badania własności fizycznych tych nowoczesnych nanomateriałów, pod kątem ich możliwych zastosowań, wykraczających poza fizykę ciała stałego, a obejmujących takie dziedziny jak telekomunikacja, informatyka czy konwersja energii. Zamierzamy opracować metody wytwarzania cienkich warstw TMMC (od kilku warstw do monowarstwy), a następnie przeprowadzić badania ich własności optycznych i elektronicznych. Badania te będą skupione na wpływie silnego ograniczenia przestrzennego i anizotropii w płaszczyźnie warstwy na własności ekscytonów w tych materiałach, również poddanych działaniu pola magnetycznego. Szczególnym wyzwaniem jest eksperymentalne wyznaczenie kolejności energetycznej stanów ekscytonowych i weryfikacji hipotezy teoretycznej, że mogą one być opisane modelem Motta-Wanniera. Dodatkowym celem naszych badań jest pokazanie, że unikalne własności hetero struktur 2D TMMC, takie jak przerwa optyczna przestrajalna w szerokim zakresie, trwałe ekscytony i anizotropia mogą być z powodzeniem wykorzystane w nowoczesnych urządzeniach optoelektronicznych.

## 2. Znaczenie projektu

Otrzymanie mono-warstwowego grafenu i zbadanie jego własności bardzo szybko zwróciło uwagę na inne materiały 2D, takie jak mono- i dichalkogenki metali przejściowych (TMMC i TMDC), heksagonalny azotek boru, czarny fosfor, żeby wymienić tylko kilka. Podobnie jak inne materiały 2D, również TMMC wykazują systematyczne zmiany własności strukturalnych, elektronicznych i optycznych wraz z obniżaniem wymiarowości. Dodatkowo, w związku z silną anizotropią, te tzw. dwuskładnikowe odpowiedniki fosforu stanowią nową platformę dla badań efektów wielociałowych w ściśle dwuwymiarowych strukturach. Materiały te wykazują silną anizotropię własności elektronicznych. Ponadto, dzięki unikalnym własnościom posiadają duży potencjał do zastosowań w optoelektronice, informatyce, telekomunikacji czy konwersji energii. Elektroniczne, strukturalne i optyczne własności TMMC są przedmiotem intensywnych badań teoretycznych. Jednakże, ze względu na trudności w otrzymaniu cienkich warstw tych materiałów (od kilku do pojedynczej warstwy atomowej) ich badania eksperymentalne nie zostały dotychczas przeprowadzone.

## 3. Metoda badawcza

Projekt jest ściśle związany z wytworzeniem cienkich płatków TMMC o grubości od kilku warstw do monowarstwy. W pracy wykorzystamy nasze umiejętności nabyte przy opracowaniu wytwarzania monowarstw TMDC. Badania planowane w projekcie obejmują zarówno prace eksperymentalne (głównie spektroskopię optyczną) jak i teoretyczne (między innymi wielkoskalowe obliczenia numeryczne). Elektroniczne i optyczne własności badanych heterostruktur, takie jak energetyczne przerwy optyczne i kwazicząstkowe, energie wiązania ekscytonów, polaryzację absorbowanego i emitowanego światła, energie fononów itp. będą wyznaczone w szerokiej gamie badań komplementarnych, tzn. polaryzacyjnie rozdzielonych pomiarach: odbicia (pseudo absorpcji), fotoluminescencji, pobudzania fotoluminescencji i rozpraszania Ramana, w których to badaniach posiadamy duże doświadczenie. Większość badań będzie przeprowadzonych w naszym laboratorium przy użyciu dobrze wyposażonej infrastruktury do otrzymywania i badań heterostruktur 2D. Pewne badania wymagające specjalistycznej aparatury niedostępnej we Wrocławiu będą przeprowadzone w laboratoriach naszych polskich i zagranicznych partnerów naukowych.

Badania eksperymentalne będą wspomagane analizą teoretyczną i obliczeniami numerycznymi. Widma jednocząstkowe będą analizowane metodami standardowymi, a do badań ekscytonów zastosujemy metody dokładnej diagonalizacji macierzy Hamiltonianu oddziaływania w konfiguracji bazowej dla skończonej ilości cząstek, w których to obliczeniach posiadamy duże doświadczenie.

## 4. Wpływ rezultatów

Badania optycznych i elektronicznych własności heterostruktur van der Waalsa monochalkogenków metali przejściowych IV grupy poszerzą podstawową wiedzę fizyczną tych ściśle dwuwymiarowych układów. Rezultaty naszych badań będą miały potencjalny wpływ na inne dyscypliny naukowe i zastosowania w nowoczesnych urządzeniach elektronicznych. Również ważne będzie włączenie studentów do badań nowoczesnych materiałów.