

Tło. W codziennym życiu używamy dużą liczbę urządzeń elektronicznych, czasami nie wiedząc dokładnie nawet jak się nazywają. Wszystkie są makroskopowe tj. mają rozmiary przystające skala do świata ludzkiego: 1 mm, 1 cm, czy 1 m. Ale w ich środku znajdują się mikronowej wielkości częstokroć urządzenia wynalezione przez człowieka, takie jak ogniwo galwaniczne (wewnątrz baterii litowej), kondensator (w urządzeniu podtrzymującym działanie urządzeń elektrycznych, UPS, czy w systemie zapłonowym auta), złącze n-p (w baterii słonecznej), czy tranzystor polowy (w procesorach naszych komputerów). W 2021 do tego zestawu doszło nowe urządzenie, zaproponowane przez dwóch polskich naukowców i Włocha. Jest ono dużo mniejsze niż poprzednie (tzn. jest nano-urządzeniem) a jego cechy także różnią się od tych wykazywanych przez wzmiankowane urządzenia. Nowy przyrząd zwany jest chemicznym kondensatorem lub krótko (z angielskiego) chem-cap. Chem-cap jest złożony z czterech substancji chemicznych: jedna jest podłożem, gdyż następnie są na niej narastane, kolejna rezerwuarem ładunku, gdyż jest bogata w elektrony, następną jest separator, a ostatnia jest uboga w elektrony. Ewentualnie można do tego zestawu dołożyć piątą warstwę, chroniącą całość od góry. Jedną z najważniejszych cech urządzenia chem-cap jest to, że gdyby separatora nie było, to zaszłaby bardzo gwałtowna (nawet wybuchowa!) reakcja chemiczna między warstwami ubogimi i bogatymi w elektrony. Choć to nowatorskie urządzenie wydaje się być jak na razie jedynie wymysłem teoretyków, można wskazać przynajmniej jeden podobny przykład znany eksperymentalnie, który udowadnia, że chem-cap mógłby istotnie zostać zbudowany z użyciem nowoczesnych technologii nano-fabrykacji. **Powody eksploracji zagadnienia.** Z każdą nową 'zabawką' naukową wiążą się niespodzianki, sukcesy, porażki i ryzyko. I powinniśmy dobrze zrozumieć nowe urządzenie zanim wprowadzimy je do codziennego użycia jako komponent większych zestawów. Wstępne prace badawcze pokazały, że chem-cap wykazuje nietypową kombinację cech, nieznaną dla innych urządzeń. Tą najważniejszą jest możliwość „wstrzykiwania” kontrolowanej ilości elektronów do i z niemal dowolnego typu materiału. Nawet jeśli startowe materiały nie przewodzą dobrze prądu elektrycznego, wbudowane w chem-cap mogą łatwo stać się metalami; zależy to głównie od składu chemicznego warstw ubogich i bogatych w elektrony, a także grubości i innych cech separatora. Zatem by zrozumieć zakres cech jakie może posiadać nowe urządzenie należy zbadać wiele różnych kombinacji składów i grubości separatora. To dokonuje się dziś najłatwiej z pomocą superkomputerów. Wynik bardzo złożonych obliczeń (opartych o tzw. teorię kwantów) jest zazwyczaj bardzo bliski temu co obserwuje się w eksperymencie. Niniejszy projekt zakłada dokładnie takie studium teoretyczne. **Celem projektu** są badania przesiewowe znacznej liczby rodzajów chem-cap i ich funkcjonalności. Obliczenia pozwolą zaoszczędzić wiele czasu i zaowocują wiedzą, które kombinacje mogłyby być użyteczne technologicznie. A skład materiałowy ogranicza tylko nasza fantazja!

Opis badan. Najważniejsze funkcjonalności badane to nadprzewodnictwo (tzn. przewodzenie prądu elektrycznego bez oporu), magneto-opór (tzn. znaczne zmiany przewodnictwa elektrycznego przy zmieniającym się polu magnetycznym), konwersja energii słonecznej na elektryczną, oraz przeprowadzanie reakcji chemicznych na powierzchniach metalicznych z wielką łatwością (rodzaj tzw. katalizy). **Ważne oczekiwane rezultaty.** Najbardziej ambitnym celem projektu jest dostarczenie teoretycznego dowodu na możliwość uzyskania nadprzewodnictwa w temperaturze pokojowej i bez użycia ciśnienia zewnętrznego w cienkich warstwach materiałów zawierających wodór (wodorkach). Wstępne obliczenia sugerują, że zjawisko to możliwe jest do osiągnięcia w temperaturze nawet 830 °C (ok. 1100 K), a już nawet 1/3 tej wartości oznaczałaby prawdziwy przełom technologiczny. Gdyby w oparciu o teoretyczne wskazówki takie urządzenie udało się sfabrykować w przyszłości, konsekwencje dla nauki, technologii i cywilizacji byłyby olbrzymie (łatwy transport lewitujący na poduszce magnetycznej, przesyłanie prądu bez żadnych strat i ogrzewania planety, skokowy wzrost możliwości obliczeniowych komputerów, etc.). Nigdy wcześniej nie byliśmy tak blisko tego celu jak obecnie! Innym ważnym oczekiwanym rezultatem będzie wskazanie na możliwość użycia takich powszechnie występujących metali takich jak miedź jako dobrych katalizatorów (np. dla procesów u- i odwodornienia, co było wcześniej nie do pomyślenia). Urządzenia chem-cap konstruowane mogą być podobnie do złączy n-p fabrykowanych dziś na skalę przemysłową.

Plan pracy. Projekt podzielony jest na 4 pakiety i złożony z 8 osobnych zadań. Personel to Kierownik Projektu (Grochala), jeden młody badacz ze stopniem doktora, dwóch doktorantów, dwóch ścisłych współpracowników zagranicznych, Lorenzana (Włochy) and Zurek (USA), oraz Hoffmann (USA) jako doradca. Grochala i Lorenzana są dojrzałymi badaczami, którzy zaproponowali chem-cap i chcieliby teraz znacząco poszerzyć i wykorzystać tą koncepcję.

Wymierne efekty realizacji projektu. Będzie nimi co najmniej 5 'przepisów' (tzn. drobiazgowo określonego składu chemicznego, grubości separatora i in.) które zasługują na studia eksperymentalne, m.in. trzech mogących dostarczyć nadprzewodnictwo w temperaturze pokojowej, jedna dla wydajnej konwersji światła słonecznego, i jedna do reakcji katalitycznych. Rezultaty zostaną opublikowane w czasopiśmie naukowych i zaprezentowane środowisku naukowemu w postaci wystąpień ustnych i posterowych zaś misją publiczną obejmuje popularyzację wyników językiem nietechnicznym dla szerokiego grona odbiorców.