

Od czasu odkrycia w 2004 roku grafenu – sześciokątnej struktury o grubości pojedynczego atomu zbudowanej z atomów węgla – oraz jego niezwykłych właściwości, zainteresowanie układami dwuwymiarowymi nieustannie wzrasta. Szczególnie ciekawe są materiały na bazie dichalkogenków metali przejściowych, takich jak związki molibdenu i wolframu z siarką, selenem i tellurem. W formie dwuwymiarowej są one półprzewodnikami emitującymi światło w zakresie widzialnym, co pozwala na ich zastosowanie np. w tranzystorach, ogniwach fotowoltaicznych i urządzeniach optoelektronicznych. Symetria ich budowy krystalicznej oraz obecność ciężkich atomów metalu prowadzi do sprzężenia właściwości optycznych ze spinowymi. Zjawisko to otwiera ogromne możliwości dla rozwoju optoelektroniki, na przykład w dziedzinie komputerów kwantowych.

Rozwój technologii otrzymywania tych materiałów pozwolił na uzyskanie tak zwanych struktur van der Waalsa, składających się z dwóch lub więcej pojedynczych warstw atomów ułożonych na sobie w pionie – jak klocki Lego. Umożliwia to kontrolę właściwości materiałów w celu uzyskania wartości pożądanych dla określonych zastosowań. Ich zrozumienie i wykorzystanie wymaga prowadzenia badań eksperymentalnych i teoretycznych. Te ostatnie nie są jeszcze w pełni rozwinięte, by ilościowo scharakteryzować i przewidywać właściwości struktur dwuwymiarowych

Jednym ze sposobów badania właściwości półprzewodników jest pomiar ich widm optycznych w polu magnetycznym. Pozwala ono między innymi na wgląd w strukturę ekscytonów – charakterystycznych cząstek występujących w półprzewodnikach i determinujących ich właściwości optyczne. Zewnętrzne pole magnetyczne zmienia energię ekscytonów, co objawia się przesunięciem pików w zmierzonych widmach, a jego wielkość jest opisywana przez tak zwane g-czynniki. W materiałach dwuwymiarowych parametry te osiągają niespotykane dotąd wartości, co stymuluje obecne badania eksperymentalne i teoretyczne. Wartości g-czynników zależą także od czynników takich jak naprężenia, pole elektryczne, kąt skręcenia i ułożenie warstw w strukturach van der Waalsa. Zrozumienie tych zależności ma fundamentalne znaczenie dla badań tych materiałów i ich zastosowań technologicznych.

Celem niniejszego projektu jest zbadanie g-czynników ekscytonowych w strukturach van der Waalsa na bazie kilku klas materiałów: ortorombowych monochalkogenków, heksagonalnych dichalkogenków i trichalkogenków, a także nowo odkrytych związków MA_2Z_4 , w formie kryształów objętościowych, monowarstw i heterostruktur warstwowych. Obliczenia będą prowadzone w ramach Teorii Funkcjonału Gęstości (ang. DFT) – kwantowomechanicznej metody pozwalającej na precyzyjne wyznaczenie g-czynników. Ponadto, zbadany zostanie wpływ wybranych czynników zewnętrznych: naprężeń, ciśnienia hydrostatycznego i pola elektrycznego, oraz konfiguracyjnych: składu heterostruktury, ułożenia i względnego kąta skręcenia warstw, z których jest zbudowana. Zostanie także opracowana nowa metodologia badań ekscytonów hybrydowych. Rezultaty obliczeń pomogą w ilościowej interpretacji wyników najnowszych badań eksperymentalnych prowadzonych przez zagranicznych współpracowników. Będą także stanowić bazę dla inżynierii g-czynników ekscytonów dla szerokiej klasy układów dwuwymiarowych. Pozwolą one również na przewidywanie właściwości nowych, niebadanych dotąd materiałów. Efekty tego projektu będą stanowić wkład do podstawowych badań materiałowych metodami fizyki teoretycznej i obliczeniowej, które są konieczne do opracowania nowych technologii i urządzeń optoelektronicznych.