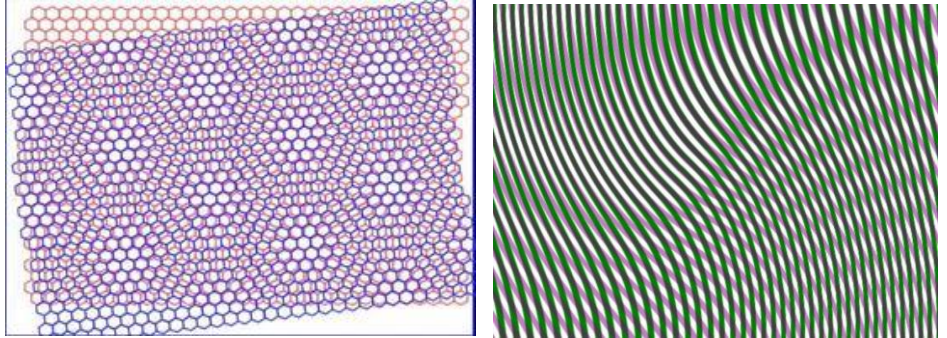


Prążki Moire, pokazane na rysunku poniżej, to wielkoskalowe struktury interferencyjne, które pojawiają się gdy dwie sieci periodyczne, nachylone względem siebie, są nałożone jedna na drugą. Spotykamy się z nimi także w codziennym życiu, ich intrygująca estetyka jest często inspiracją dla artystów, widzimy je też na zdjęciach niewprawnych fotografów. Co ciekawe, niedawno naukowcy

zdołali wytworzyć prążki Moire w najmniejszej możliwej skali – w skali atomowej. Od około dwudziestu lat jesteśmy świadkami rewolucji w inżynierii materiałów spowodowanej odkryciem materiałów dwuwymiarowych (2D), gdzie płatki materiału składają się z ultracienkich



warstw o grubości pojedynczego atomu. Wyczuleni na estetykę naukowcy dostrzegli, że nałożenie na siebie dwóch takich płatków być może pozwoli na wytworzenie miniaturowych prążków Moire. Efekt nie rozczarował, a nawet przekroczył najśmielsze oczekiwania. Prążki Moire udało się wytworzyć, a powstałych materiałach można zaobserwować całą gamę emergentnych parametrów porządku. Dwa płatki, które osobno były po prostu nudnymi metalami, złożone razem okazały się być materiałami nadprzewodzącymi, magnetycznymi albo ferro-elektrycznymi. W ten sposób prążki Moire stają się nie tylko materiałem dla artystów, ale także dla inżynierów. W niedalekiej przyszłości można sobie wyobrazić, że posłużą mogą do wytworzenia miniaturowych magnesów, przydatnych choćby jako przełączniki aktywujące molekuły leków w organizmie.

Napotykamy tutaj jednak na poważny problem. Prążki Moire, z małym kątem względnego nachylenia, mimo iż wydają się miniaturowe z naszej makroskopowej perspektywy, są przeogromne w skali atomowej. Aby zobrazować efekt prążków w całej okazałości, a także aby w pełni wykorzystać ich własności emergentne, potrzeba zobrazować struktury zawierające tysiące atomów. Potrzebujemy więc metod teoretycznych zdolnych do opisu tak wielkich struktur, ale metody mechaniki kwantowej są w tym przypadku zbyt kosztowne obliczeniowo. W istocie ten problem z prążkami Moire należy do większej grupy problemów, gdzie naukowcy są w stanie wytworzyć struktury nanometryczne, ale nie mamy metod teoretycznych aby opisać ułożenie atomów w takich strukturach i ich stabilność, lub inaczej skłonność do przebudowy poprzez relaksację sieci. Dla największych struktur można oczywiście przyjąć maksymalnie uproszczony model, zapominając o wszelkich własnościach chemicznych, tak że np. atom węgla staje się identyczny z atomem krzemu lub cyny. Nasza wiedza eksperymentalna przeciwstawia się temu maksymalnemu uproszczeniu, wiemy że nanostruktury oparte na różnych pierwiastkach nie są takie same, dla przykładu tylko niektóre dwu-warstwy Moire mają własności magnetyczne, a inne ich nie posiadają.

Pojawia się więc następujące pytanie: czy można podać metodę teoretyczną, która z jednej strony będzie w stanie objąć atomowo gigantyczne struktury a z drugiej będzie miała odpowiedni wgląd we właściwości chemiczne każdego z atomów. A co więcej będzie wystarczająco prosta aby być satysfakcjonującym narzędziem dla inżynierów projektujących nowe urządzenia. W naszym projekcie naukowcy z różnych dziedzin, inżynierii obliczeniowej i fizyki ciała stałego, będą pracować razem aby osiągnąć pozytywną odpowiedź na to pytanie. Naszym celem jest opracowanie takiej optymalnej metody a następnie sprawdzenie jak działa dla najcieńszych płatków zbudowanych z różnych pierwiastków. Mamy nadzieję, że uda nam się zinterpretować wyniki niedawnych ekscytujących eksperymentów, a w ten sposób zrozumieć też dlaczego, na głębszym poziomie, struktury Moire są dla nas tak fascynujące.