

Streszczenie

Wieloskalowe modelowanie dwuwymiarowych warstwowych materiałów zbudowanych z węgla, boru i azotu

Materiały dwuwymiarowe wykazują szereg intrygujących własności, które można w miarę łatwo modyfikować i projektować funkcjonalności w zależności od potrzeb. Rodzina układów grafeno-podobnych, zawierających węgiel, bor oraz azot, o ogólnym wzorze $C_xB_yN_{1-x-y}$ zawiera takie klasy materiałów, jak grafen domieszkowany borem lub/i azotem, heksagonalny azotek boru (hBN) domieszkowany węglem, jak również struktury CBN wykazujące porządek długiego zasięgu. W literaturze można znaleźć wiele prac dotyczących metod wytwarzania układów CBN, jak i teoretycznych przewidywań własności różnorodnych konfiguracji atomów C, B i N. Jednakże, wciąż nie mamy kompletnej wiedzy dotyczącej możliwości równowagowej syntezy tych związków, ich stabilności, czy przejść fazowych.

Te tematy poruszam w swojej pracy doktorskiej. Przeprowadzam teoretyczne badania stabilności stopów CBN dla szerokiego zakresu koncentracji poszczególnych atomów, w oparciu o metody (i) Cluster Expansion, oraz (ii) pól siłowych (VFF). Wyznaczam konfiguracje odpowiadające najniższym energiom wykorzystując podejścia (i) i (ii), w połączeniu z symulacjami Monte Carlo w układach liczących tysiące atomów. To pozwala na realistyczny opis nieperiodycznych struktur CBN. We wszystkich badanych układach, równowagowe konfiguracje odbiegają znacząco od losowych, wykazując natomiast porządek krótkiego zasięgu, tzn. wiązania N-N i B-B są niekorzystne i właściwie nie występują, zaś w trójskładnikowych stopach obserwuję tendencję do separacji na domeny grafenu i obszary hBN.

W szczególności wyznaczam parametry hamiltonianu w modelu Cluster Expansion dla grafenu domieszkowanego borem/azotem, oraz szacuję dokładność otrzymanych modeli. Seria testów dostępnych potencjałów empirycznych (Tersoff, ReaxFF i COMB3) pokazuje, że żadna z dostępnych parametryzacji nie daje całkiem zadowalających wyników w 2-wymiarowych stopach CBN. Łącząc i modyfikując różne parametryzacje potencjału Tersoffa, poprawiam jego dokładność.

Prezentuję również przykładowe wyniki dla płatków grafenowych oraz dyskutuję elektronową gęstość stanów dla wybranych struktur CBN.