

Mirali Jafari

Rozprawa doktorska

Tytuł: Właściwości elektronowe, magnetyczne i transportowe wybranych heterostruktur van der Waalsa

Streszczenie

Badania nad dwuwymiarowymi (2D) kryształami oraz heterostrukturami van der Waalsa (vdW), dzięki swoim niezwykłym właściwościom, w ostatnich latach cieszą się ogromnym zainteresowaniem z uwagi na ich potencjalne zastosowania w elektronice, spintronice oraz optoelektronice. Pierwszym eksperymentalnie otrzymanym i zarazem jednym z najbardziej obiecujących kryształów dwuwymiarowych jest grafen, który mimo swoich wyjątkowych cech (takich jak niezwykle wysoka ruchliwość elektronów, wytrzymałość mechaniczna, doskonała przewodność elektryczna i cieplna oraz wiele innych) to jednak, ze względu na brak przerwy energetycznej, wydaje się mieć dość ograniczone zastosowanie w kontekście technologii półprzewodnikowych i elementów elektronicznych (np. tranzystory). To ograniczenie skłoniło badaczy do poszukiwania kolejnych dwuwymiarowych materiałów i doprowadziło do odkrycia nowych struktur 2D, takich jak silicen (dwuwymiarowy kryształ krzemu), heksagonalny azotek boru (h-BN), dichalkogenki metali przejściowych (TMDC) oraz inne materiały warstwowe. Każdy z tych materiałów wykazuje odmienne zachowania, od metalicznych po nieprzewodzące, a także od niemagnetycznych po magnetyczne. Ponieważ magnetyzm odgrywa istotną rolę we współczesnych technologiach, materiały 2D o właściwościach magnetycznych wzbudzają szczególne zainteresowanie. Wśród nich na uwagę zasługują dwuwymiarowe dichalkogenki wanadu (VX_2) oraz trójjodki chromu (CrI_3), charakteryzujące się wewnętrznym magnetyzmem i będące podstawą do dalszych badań nad rozwojem wydajnych urządzeń dla elektroniki spinowej (np. zawory spinowe).

Niniejsza rozprawa doktorska, składająca się ze zbioru powiązanych tematycznie artykułów naukowych, przedstawia wyniki badań teoretycznych dotyczących własności elektronowych, magnetycznych i transportowych wybranych kryształów dwuwymiarowych oraz ich heterostruktur van der Waalsa. W badaniach zastosowano zaawansowane techniki obliczeniowe oparte na teorii funkcjonału gęstości (DFT), uzupełnione metodami teoretycznymi takimi jak nierównowagowe funkcje Greena, oraz modele efektywne oparte o metodę $k \cdot p$.

Rozprawa rozpoczyna się od części wprowadzającej, obejmującej cele i motywację pracy, a następnie omawia najważniejsze materiały 2D wykorzystane w badaniach. W

dalszej części przedstawiono wstęp do teorii obliczeń z pierwszych zasad, w tym do teorii funkcjonału gęstości (DFT) oraz krótki opis pozostałych zagadnień teoretycznych stosowanych w publikacjach składających się na rozprawę doktorską. Następnie zaprezentowano cztery artykuły oraz preprint wchodzące w skład cyklu prac stanowiących rozprawę.

Badania obejmują analizę wpływu dwuosiowych naprężeń mechanicznych oraz różnych metod domieszkowania atomami magnetycznymi na silicen, co pozwala znacząco zmienić jego znakomite właściwości w postaci bez domieszek. W drugim etapie pracy szczegółowo zbadano monowarstwy oraz dwuwarstwy dichalkogenków wanadu w różnych fazach krystalograficznych, wskazując na ich wewnętrzne uporządkowanie magnetyczne i potencjalne zastosowania w urządzeniach typu zawór spinowy. W niniejszej pracy przedstawiono także wyniki badań nad nowymi skreconymi heterostrukturami zawierającymi grafen, w szczególności nad heterostrukturą grafen/CrI₃, w celu analizy zjawisk magnetyzmu indukowanego efektami bliskościowymi oraz dolinowo-zależnego transportu, z myślą o potencjalnych zastosowaniach takich struktur w urządzeniach elektronicznych.

Słowa kluczowe: heterostrukтуры van der Waalsa (vdW) – materiały magnetyczne – spintronika – zawory spinowe – teoria funkcjonału gęstości (DFT)