

# Płaski świat magnetycznych materiałów warstwowych i jak komputery mogą pomóc w przewidywaniu ich właściwości

2020

1920

Tomasz Necio, Aleksandra Jankowska, Magdalena Birowska

1920-2020



100 LAT POLSKIEGO TOWARZYSTWA FIZYCZNEGO

*Uniwersytet Warszawski, Wydział Fizyki, 00-092 Warszawa, Pasteura 5*

Grafen to najbardziej znany przedstawiciel materiałów płaskich, popularnie nazywanych strukturami dwuwymiarowymi (2D) [1], do których należą materiały wykazujące właściwości metaliczne, półprzewodnikowe (np. TMD's), czy izolujące (np. hBN). Popularność tych materiałów często wiąże się z ich właściwościami np. wyjątkowo wysoką ruchliwością nośników, co może zostać potencjalnie wykorzystane przy projektowaniu nowej generacji ultraszybkich urządzeń elektronicznych.

Ostatnio do tej klasy związków dołączyły dwuwymiarowe materiały magnetyczne [2], m.in. takie związki jak  $\text{MPS}_3$  (z ang. metal phosphorous trisulfides). Materiały te wykazują antyferromagnetyczne uporządkowanie spinów, których wynikiem jest zerowe namagnesowanie próbki. Materiały te ciężko jest badać przy użyciu obecnie dostępnych metod doświadczalnych. Stąd, badania teoretyczne są tutaj nieocenione dając możliwość wglądu w naturę oddziaływań magnetycznych, a także przewidywaniu różnych właściwości tych materiałów.

W pracy przedstawimy badania teoretyczne oparte o teorię funkcjonałów gęstości (DFT), która jest powszechnie uważana za jedną z najdokładniejszych metod teoretycznych przewidujących właściwości nanostruktur. Badania te dotyczą właściwości energetycznych, optycznych, a także magnetycznych materiałów  $\text{MnPS}_3$ , oraz  $\text{NiPS}_3$ . Badania materiałów magnetycznych są ważne i mogą przyczynić się do utworzenia szybkich, energooszczędnych pamięci magnetycznych.

Praca powstała przy współpracy z grupą teoretyczną z Uniwersytetu Technicznego w Dreźnie (TU Dresden). Pragniemy podziękować Dr Jens'owi Kunstman oraz Prof. Gotthard'owi Seifert za owocne dyskusje. Praca finansowana jest z Narodowego Centrum Nauki, nr projektu UMO-2016/23/D/ST3/03446.

## Literatura:

1. K. S. NOVOSOLEV *ET AL.*, SCIENCE 2016, VOL. 353, P. 461
2. M. GIBERTINI *ET AL.*, NATURE NANOTECHNOLOGY 2019, VOL. 14, P. 408

SŁOWA KLUCZOWE: DWUWYMARIOWE MATEIAŁY MAGNETYCZNE (2D), NANOMATERIAŁY, DFT

