

Autoreferat

Marcin Kurpas

Instytut Fizyki im. Augusta Chełkowskiego
Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych
Uniwersytet Śląski w Katowicach

Chorzów, Maj 2026

Spis treści

1 Imię i Nazwisko	3
2 Posiadane dyplomy i stopnie naukowe	3
3 Informacje o zatrudnieniu w jednostkach naukowych	3
4 Wskazanie osiągnięcia wynikającego z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki	4
4.1 Wstęp	5
4.2 Oddziaływanie SO i relaksacja spinu w materiałach 2D	5
4.2.1 Oddziaływanie SO i relaksacja spinu w czarnym fosforze	7
4.2.2 Oddziaływanie SO jednoelementowych materiałach 2D	13
4.2.3 Oddziaływanie SO i relaksacja spinu w jednowarstwowym PtSe ₂	16
4.2.4 Parametr mieszania spinu w nadprzewodnikach Isinga typu II-go	18
4.3 Efekty bliskości spin-orbita w hybrydowych heterostrukturach van der Waalsa . .	24
4.4 Podsumowanie	31
4.5 Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo-badawczych	32
4.6 Lista prac opublikowanych po uzyskaniu stopnia doktora z wyłączeniem prac H1-H8 przedstawionych jako osiągnięcie naukowe.	34
4.7 Dane naukometryczne	36
5 Informacja o wykazywaniu się istotną aktywnością naukową albo artystyczną realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury, w szczególności zagranicznej.	36
5.1 Współpraca naukowa	36
5.2 Granty	37
5.3 Staże i wizyty naukowe	37
5.4 Wybrane prezentacje na konferencjach naukowych, sympozjach i seminariach . .	38
6 Informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę lub sztukę	39
6.1 Działalność dydaktyczna i popularyzatorska	39
6.2 Doświadczenie dydaktyczne	40
6.2.1 Opieka nad studentami	41
6.3 Działalność organizacyjna i ekspercka	42

1 Imię i Nazwisko

Marcin Kurpas

2 Posiadane dyplomy i stopnie naukowe

- **10/2009 Doktor nauk fizycznych** w zakresie fizyki, Uniwersytet Śląski w Katowicach.
Tytuł rozprawy: *Entanglement of remotely located solid state qubits*.
Promotor: Prof. dr hab. Elżbieta Zipper.
- **6/2005 Magister Fizyki**, Uniwersytet Śląski w Katowicach.
Tytuł rozprawy: *Wizualizacja fundamentalnych zjawisk fizyki z wykorzystaniem biblioteki Open GL*
Promotor: dr hab. prof. UŚ Władysław Borgiel.
- **6/2003 Licencjat Fizyki**, Uniwersytet Śląski w Katowicach, Katowice, 2003 r.
Tytuł rozprawy: *Generowanie dźwięku we współczesnych systemach komputerowych*.
Promotor: dr Aleksander Dawid

3 Informacje o zatrudnieniu w jednostkach naukowych

- **2021 - obecnie** profesor Uniwersytetu Śląskiego,
- **2015-2017** post-doc, Uniwersytet w Regensburgu,
- **15/10/2014 - 31/01/2015** pracownik naukowy (guest researcher) Uniwersytet w Regensburgu,
- **2010 - 2020** adiunkt, Instytut Fizyki, Uniwersytet Śląski w Katowicach
- **7/2009 - 1/2010** pracownik naukowy (researcher), Nordic Hysitron Laboratory, Department of Material Science and Engineering, Aalto University, Espoo, Finland

4 Wskazanie osiągnięcia wynikającego z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki

Jako osiągnięcie naukowe przedstawiam cykl 8 artykułów naukowych opublikowanych w latach 2016-2025 na temat ”**Własności spinowo-orbitalne materiałów van der Waalsa**”.

- H1** Marcin Kurpas, Martin Gmitra, and Jaroslav Fabian, **Spin-orbit coupling and spin relaxation in phosphorene: Intrinsic versus extrinsic effects**, Physical Review B, 94, 155423 (2016); Impact factor: 3.836
- H2** Ahmet Avsar, Jun Y. Tan, Marcin Kurpas, Martin Gmitra, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Jaroslav Fabian and Barbaros Özyilmaz, **Gate-tunable black phosphorus spin valve with nanosecond spin lifetimes**, Nature Physics **13**, 888 (2017); Impact Factor : 22.727
- H3** Marcin Kurpas, Martin Gmitra, Jaroslav Fabian, **Spin properties of black phosphorus and phosphorene, and their prospects for spin calorics**, J. Phys. D: Appl. Phys. **51** 174001 (2018); Impact Factor: 2.588
- H4** Marcin Kurpas, and Jaroslav Fabian, **Intrinsic and extrinsic spin-orbit coupling and spin relaxation in monolayer PtSe₂**, Physical Review B **103**, 125409 (2021); Impact Factor: 3.78
- H5** Marcin Kurpas, Paulo E. Faria Junior, Martin Gmitra, Jaroslav Fabian, **Spin-orbit coupling in elemental two-dimensional materials**, Physical Review B **100**, 125422 (2019); Impact Factor: 3.62
- H6** Paulina Jureczko, Jozef Haniš, Paulo E. Faria Junior, Martin Gmitra, and Marcin Kurpas **Probing type-II Ising pairing using the spin-mixing parameter**. Physical Review B **109**, 165428 (2024); Impact Factor: 3.7
- H7** Marcin Kurpas, **Proximity spin-orbit coupling in a small-diameter armchair carbon nanotube on monolayer bismuthene**, Physical Review B **108** (19), 195408 (2024); Impact Factor: 3.7
- H8** Marcin Kurpas, Marko Milivojević, Martin Gmitra, **Armchair carbon nanotube on Pt and hBN/Pt: From strong metallic contact to coherent spin transport regime**, Physical Review B **111**, 035402 (2025); Impact Factor: 3.7

Sumaryczny Impact Factor H1-H8: 47.651

Oświadczenia indywidualnego wkładu habilitanta oraz współautorów w powstanie prac **H1-H8** są dołączone do wniosku.

4.1 Wstęp

Powstaniu nowych nurtów fizyki zwykle towarzyszą przełomowe odkrycia. W fizyce ciała stałego, jednym z takich odkryć było wyizolowanie przez A. Geima i K. Novoselova pojedynczych warstw grafenowych [1]. Odkrycie to przełamało wieloletnie przekonanie, że materiały dwuwymiarowe (2D) nie mogą istnieć z powodu twierdzenia Mermin–Wagnera [2]. Obecnie wiadomo, że rzeczywiste próbki grafenu — o skończonych rozmiarach i z naturalnymi deformacjami sieci — nie naruszają tego twierdzenia, co umożliwia istnienie stabilnych faz 2D.

Badania transportowe grafenu, w tym eksperymentalna weryfikacja liniowej dyspersji Diraca [3, 4], wykazały, że własności elektronowe materiałów 2D są odporne na niedoskonałości strukturalne i ograniczoną wielkość próbek. Otworzyło to drogę do gwałtownego rozwoju badań nad materiałami dwuwymiarowymi w fizyce ciała stałego, inżynierii materiałowej i spintronice [5, 6].

W ciągu dwóch dekad od odkrycia grafenu rodzina materiałów 2D rozrosła się do setek układów przewidywanych jako stabilne na podstawie obliczeń *ab initio* [7, 8]. Obejmuje ona materiały o szerokim spektrum właściwości — od metali i półprzewodników po izolatory, układy magnetyczne i nadprzewodniki [9, 10]. Tak duża różnorodność czyni materiały 2D atrakcyjną platformą zarówno do badań podstawowych, jak i do rozwoju technologii kwantowych [11] oraz spintroniki [12].

Głównym celem badań habilitanta było poznanie wybranych właściwości atomowo cienkich materiałów van der Waalsa w kontekście ich zastosowań spintronicznych. Centralnym zagadnieniem była analiza oddziaływania spin–orbita (SO), które — obok oddziaływania wymiany — stanowi podstawowy mechanizm kontroli stanu spinowego elektronu. Cykl prac składających się na osiągnięcie naukowe podzielono na dwie grupy tematyczne, połączone wspólnym motywem, którym jest oddziaływanie SO. W każdej z grup przedstawiono motywację badawczą oraz niezbędne tło teoretyczne pozwalające umiejscowić wyniki w aktualnym stanie wiedzy. Badania oparto na obliczeniach z zasad pierwszych w ramach teorii funkcjonału gęstości (DFT), wspieranych analizą symetrii i modelami efektywnymi. Pozwoliło to zarówno na niezależną weryfikację wyników numerycznych, jak i na identyfikację kluczowych mechanizmów odpowiedzialnych za obserwowane zjawiska.

4.2 Oddziaływanie SO i relaksacja spinu w materiałach 2D

W spintronice, obok ładunku elektronu fundamentalną rolę odgrywa także jego spin [12, 13]. Nośnikiem informacji jest magnetyzacja będąca makroskopowym odpowiednikiem spinu. Natu-

ralnym wymogiem jest zatem, aby średni czas zaniku magnetyzacji, tzw. czas relaksacji spinu τ_s określający skalę czasową związaną z przechowywaniem informacji, był odpowiednio długi.

Procesy relaksacji spinu mogą wynikać z wielu mechanizmów, m.in. rozpraszania na domieszkach lub defektach magnetycznych [14, 15, 16], oddziaływań elektron–elektron [17], elektron–dziura (mechanizm Bir–Pikus) w silnie dziurowo domieszkowanych półprzewodnikach [18, 12] czy oddziaływania nadsubtelnego [19]. W materiałach niemagnetycznych, pozbawionych zlokalizowanych momentów magnetycznych, dominującą rolę odgrywają dwa mechanizmy: Elliotta–Yafeta (EY) [20, 21] oraz Dyakonova–Perela (DP) [22, 23]. Oba łączą relaksację spinu z obecnością oddziaływania spin–orbita oraz procesami rozpraszania pędu, stanowiąc podstawę współczesnego opisu dynamiki spinowej w materiałach niemagnetycznych [12, 24].

Mechanizm Elliotta–Yafeta

Elliott pokazał [20], że prawdopodobieństwo zmiany kierunku spinu τ_s^{-1} jest proporcjonalne do prawdopodobieństwa rozpraszania pędu τ_p^{-1} pomnożonego przez tzw. *parametr mieszania spinu* b^2

$$\tau_{s,eY}^{-1} = \alpha b^2 \tau_p^{-1}, \quad (1)$$

gdzie α jest empirycznym parametrem z przedziału 1-10 [25], a b^2 jest uśrednionym po powierzchni Fermiego parametrem mieszania spinu $b^2 = \langle b_{\mathbf{k}}^2 \rangle_{FS}$.

Źródłem niezerowej wartości $b_{\mathbf{k}}^2$ jest wewnętrzne (intrinsic) oddziaływanie SO, które miesza amplitudy stanów spinowych $\uparrow$ i $\downarrow$, wskutek czego stany Blocha nie są już czystymi spinorami

$$\begin{aligned} \psi_{n,\mathbf{k}}^{\uparrow}(\mathbf{r}) &= [a_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})|\uparrow\rangle + b_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})|\downarrow\rangle] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \\ \psi_{n,\mathbf{k}}^{\downarrow}(\mathbf{r}) &= [a_{n,-\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})|\downarrow\rangle - b_{n,-\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})|\uparrow\rangle] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \end{aligned} \quad (2)$$

gdzie n jest indeksem pasma, a zespolone amplitudy $a_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ i $b_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ są funkcjami okresowymi sieci. Z równania (2) wynika, że $\psi_{n,\mathbf{k}}^{\uparrow}(\mathbf{r})$ i $\psi_{n,\mathbf{k}}^{\downarrow}(\mathbf{r})$ są mieszaninami czystych stanów spinowych (Pauliego) $|\uparrow\rangle$ i $|\downarrow\rangle$. Znaczenie etykiet $\uparrow$ i $\downarrow$ w indeksie górnym, które oznaczają dwa ortogonalne stany zdegenerowane, staje się jasne, jeśli SOC jest słabym zaburzeniem. Wówczas, zgodnie z konwencją, $a \sim 1$, podczas gdy zaburzenie generuje małą amplitudę $b \sim \lambda/\Delta E$, przeciwnego spinu, gdzie λ jest stałą sprzężenia SO, a ΔE typową szerokością pasma [20].

Parametr mieszania spinu $b_{n,\mathbf{k}}^2$ jest zdefiniowany jako [26]

$$b_{n,\mathbf{k}}^2 = \int_{u.c.} |b_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}, \quad (3)$$

gdzie całkowanie przebiega po całej komórce elementarnej. Dla cząstek o spinie 1/2 parametr

$b_{n,\mathbf{k}}^2$ można zdefiniować jako odchyłkę od nominalnej wartości oczekiwanej spinu [26]

$$b_{n,\mathbf{k},\hat{\mathbf{s}}}^2 = \frac{1}{2} - |\langle \psi_{\mathbf{k},n,\mathbf{s}}^\sigma | \hat{S}_{\hat{\mathbf{s}}} | \psi_{\mathbf{k},n,\mathbf{s}}^\sigma \rangle|, \quad (4)$$

gdzie, $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$, a jednostkowy wektor $\hat{\mathbf{s}}$ definiuje oś kwantyzacji spinu. Dla stanów znormalizowanych $0 \leq b_{k,n,\hat{\mathbf{s}}}^2 \leq 0.5$, gdzie $b_{k,n,\hat{\mathbf{s}}}^2 = 0.5$ odpowiada całkowicie zmieszany spinom, tzn., $|a_{n,\mathbf{k},\mathbf{s}}(\mathbf{r})| = |b_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})|$, podczas gdy $b_{\mathbf{k},n,\hat{\mathbf{s}}}^2 = 0$ stany (2) są czystymi spinorami.

Mechanizm Dyakonova-Perela

Mechanizm relaksacji spinu DP aktywowany jest przez zewnętrzne sprzężenie SO wynikające ze złamania symetrii inwersji struktury, na przykład przez obecność substratu lub prostopadłego pola elektrycznego. Pojawiające się na skutek złamania symetrii pola spin-orbitalne $\Omega_{\mathbf{k}}$ są źródłem precesji składowych spinu prostopadłych do wektora $\Omega_{\mathbf{k}}$, co prowadzi do dekoherencji i randomizacji spinu, a w efekcie do zaniku magnetyzacji. Ilościowo, wpływ mechanizmu DP na relaksację spinu daje się oszacować na podstawie zależności [12]

$$\tau_{s,DP,i}^{-1} \approx \tau_p \langle \Omega_{\mathbf{k}}^2 - \Omega_{\mathbf{k},i}^2 \rangle_{FS}, \quad (5)$$

gdzie i oznacza kierunek składowej spinu S_i , $i = \{x, y, z\}$. Wzór (5) jest słuszny dla reżimu tzw. zwężenia ruchowego (ang. motional narrowing), gdy kąt precesji pomiędzy kolejnymi zdarzeniami rozpraszania pędu jest mały.

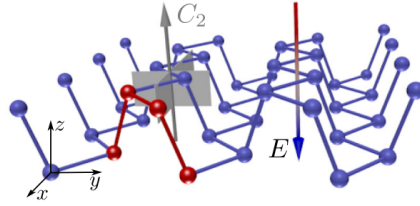
W obu mechanizmach średnie wartości b^2 i $\langle \Omega_{\mathbf{k}}^2 - \Omega_{\mathbf{k},i}^2 \rangle_{FS}$ można wyznaczyć numerycznie. Pozwala to na oszacowanie indywidualnych wkładów od mechanizmów EY i DP do relaksacji spinu ułatwiając analizę i interpretację danych eksperymentalnych.

Wiedza na temat relaksacji spinu w materiałach Van der Waalsa jest stosunkowo uboga. Eksperymenty z wstrzykiwaniem spinu wymagają ultraczułej aparatury, bardzo dobrej jakości próbek oraz dużego doświadczenia w pracy z materiałami 2D (tzw. *know how*). Wymagania te mogą spełnić nieliczne laboratoria na świecie. Z tego względu rola badań teoretycznych jest nieoceniona, gdyż stosunkowo małym kosztem, w porównaniu do technik eksperymentalnych, pozwalają one z dobrą dokładnością przewidzieć własności oraz potencjał aplikacyjny materiałów.

4.2.1 Oddziaływanie SO i relaksacja spinu w czarnym fosforze

W pracach **H1-H3** podjęliśmy problem oddziaływania SO oraz relaksacji spinu w czarnym fosforze. Badania rozpoczęliśmy od jednowarstwowego czarnego fosforu, tzw. *fosforenu*, o czym traktuje praca **H1**.

Fosforen jest materiałem półprzewodnikowym o znacznej przerwie energetycznej ok. 2.1 eV [27, 28, 29, 30]. Charakteryzuje się on wyjątkowo dużą ruchliwością nośników, rzędu 1000



Rysunek 1: Struktura krystaliczna jednowarstwowego czarnego fosforu wraz z oznaczoną osią obrotu C_2 , płaszczyznami odbicia σ_v oraz poprzecznym polem elektrycznym E . Kolorem czerwonym oznaczono atomy wchodzące w skład komórki elementarnej. Rysunek z pracy H1.

$\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ w temperaturze pokojowej [28, 30, 31]. Wraz z naturalną przerwą energetyczną stawia go jako potencjalnie atrakcyjny materiał w aplikacjach. Ponadto, słabe sprzężenie SO atomu fosforu, na poziomie dziesiątek meV [32] sugeruje długie czasy relaksacji spinu w fosforenie. Struktura krystaliczna monowarstwy czarnego fosforu, przypomina pomarszczoną strukturę plastra miodu (Rysunek 1). Można ją rozpatrywać jako układ dwuwarstwowy, w którym warstwa dolna i górna tworzą łańcuchy typu *zygzag* o silnej energii wiązania. Łańcuchy te połączone są znacznie słabszymi wiązaniami w kierunku brzegu typu *fotel*. Ta nierównowaga energii wiązania powoduje anizotropię struktury krystalicznej, która przekłada się na silnie anizotropowe własności elektronowe czarnego fosforu [29, 30, 33]. Podobnie jak próbka objętościowa, sieć krystaliczna monowarstwy opisana jest centrosymetryczną punktową grupą symetrii D_{2h} . Można się zatem spodziewać, że relaksacja spinu w fosforenie będzie zdominowana przez mechanizm EY, a mechanizm DP będzie miał drugorzędny wpływ na czas zaniku magnetyzacji.

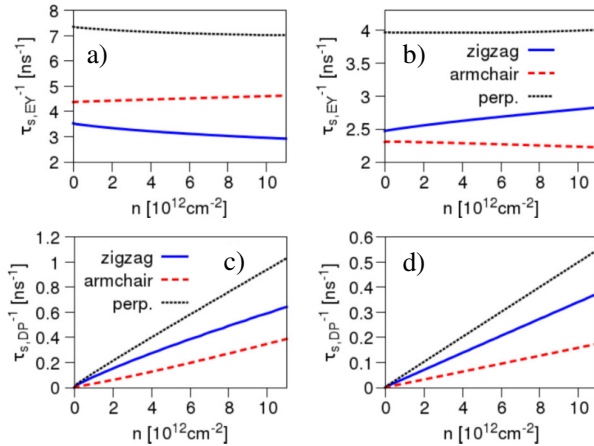
Obliczenia numeryczne w pracy **H1** przeprowadziliśmy przy użyciu pakietu Wien2K, w którym zaimplementowaliśmy procedury do obliczeń parametru mieszania spinu $b_{\mathbf{k}}^2$. Na czas prowadzenia badań był to jedyny z testowanych przez nas kodów, który poprawnie oddawał degenerację stanów spinowych fosforenu ¹. W obliczeniach zastosowaliśmy podejście LDA (ang. Local Density Approximation) uzupełnione przez zmodyfikowany potencjał Becke-Johnsona [34] (mBJ) sparametryzowany tak, aby przerwa pasmowa w punkcie Γ pierwszej strefy Brillouina była zbliżona do wartości eksperymentalnych [30].

Obliczenia struktury pasmowej wykazały, że struktura elektronowa charakteryzuje się silną anizotropią, w szczególności dla pasma dziurowego. W kierunku k_x (wzdłuż brzegu *zygzag*) brzeg pasma walencyjnego fosforenu jest praktycznie płaski, w odróżnieniu od kierunku k_y (wzdłuż brzegu *fotel*), dla którego dyspersja jest w przybliżeniu paraboliczna. Powoduje to silną anizotropię masy efektywnej, co stoi w zgodzie z wcześniejszymi doniesieniami literaturowymi [29, 30, 35]. Nasze wyniki wskazują na bezpośredni charakter przerwy, co powiązaliśmy z przyjętym funkcjonalem wymiennie-korelacyjnym (LDA+mBJ). Sprawdziliśmy, że używając funkcjonałów GGA

¹Brak degeneracji spinowej w przypadku obecności symetrii w niektórych kodach DFT wynikał z niesymorficznej symetrii sieci i problemami z jednoznacznym rozpoznaniem tych symetrii.

(PBE, PBEsol) przerwa ma charakter skośny, choć różnica energii pomiędzy maksimum pasma a jego brzegiem w punkcie Γ wynosi ok 40 meV. Doniesienia literaturowe nie są jednak w pełni zgodne co do charakteru przerwy w fosforenie [32, 35].

Następnie dokonaliśmy charakterystyki oddziaływania SO. Wartość rozszczepień spin-orbitalnych w punkcie Γ pierwszej strefy Brillouina jest rzędu 20 meV, co odzwierciedla słabe sprzężenie SO w atomie fosforu (liczba atomowa $Z = 15$). Obliczone wartości parametru mieszania spinu b_k^2 dla pasma walencyjnego i przewodnictwa w całej pierwszej strefie Brillouina zawierają się w zakresie 10^{-5} - 10^{-4} niezależnie od wyboru osi kwantowania spinu. Wyjątek stanowią okolice punktów degeneracji orbitalnej, dla których $b_k^2 \approx 1$. Obszary te są jednak poza typowym zasięgiem domieszkania i nie powinny odgrywać istotnej roli w rozpraszaniu spinu.



Rysunek 2: Prawdopodobieństwo rozpraszania spinu Elliotta-Yafeta $\tau_{s,EY}^{-1}$ oraz Dyakonowa-Perela $\tau_{s,DP}^{-1}$ w jednowarstwowym czarnym fosforze w funkcji koncentracji nośników dla pasma walencyjnego (kolumna lewa) oraz przewodnictwa (kolumna prawa) oraz dla trzech osi kwantowania spinu. Wartości $\tau_{s,DP}^{-1}$ obliczone są dla amplitudy pola $E = 1$ V/nm. Zaadaptowane z pracy H1.

na typowym poziomie 100 fs. Pokazaliśmy (Rysunek 2 a),b)), że mechanizm EY pozwala na zaobserwowanie prawie nanosekundowych czasów relaksacji spinu w monowarstwie czarnego fosforu. Przy założeniu izotropowego τ_p najsilniej rozpraszany jest spin skierowany prostopadłe do płaszczyzny materiału, prawie dwukrotnie silniej niż dla polaryzacji w płaszczyźnie materiału. Ten sam kierunek anizotropii b^2 uzyskano w pracy [35], przy czym anizotropia jest dwukrotnie większa niż ta uzyskana w naszych obliczeniach.

W eksperymentach z wstrzykiwaniem spinu (ang. spin injection) wkład do transportu/dyfuzji spinu mają zwykle nośniki z bliskiego otoczenia brzegu pasma. Mimo iż kanał transportowy jest zwykle kwazi-jednowymiarowy, proces dyfuzji spinu odbywa się z uwzględnieniem rozpraszania pędu w dwóch przestrzennych wymiarach. Aby poprawnie oddać naturę rzeczywistego procesu transferu magnetyzacji wyznaczyliśmy wartości parametru b^2 uśrednione po konturze Fermiego dla różnych wartości koncentracji nośników (poziomu Fermiego). Obliczenia przeprowadziliśmy dla trzech kierunków osi kwantyzacji spinu zgodnych z osiami układu kartezjańskiego. Dzięki temu uzyskaliśmy wgląd w anizotropię parametru b^2 .

Na podstawie obliczonych wartości b^2 oszacowaliśmy τ_s , zakładając stały i izotropowy średni czas rozpraszania pędu τ_p

W pracy **H1** badaliśmy także zewnętrzne oddziaływanie aktywowane przez przyłożenie poprzecznego pola elektrycznego E_z (Rysunek 1). Obecność pola elektrycznego łamie symetrię inwersji struktury i prowadzi do powstania oddziaływania SO typu Rashby [36], które usuwa degenerację stanów spinowych. Dla symetrii układu C_{2v} efektywny dwupasmowy hamiltonian SO Rashby ma postać:

$$H_{so} = \alpha(\sigma_y k_x - \sigma_x k_y) + \gamma(\sigma_y k_x + \sigma_x k_y) \quad (6)$$

Na podstawie obliczeń DFT dopasowaliśmy parametry hamiltonianu (6) w pobliżu brzegów pasm walencyjnych i przewodnictwa, co pozwoliło nam zbadać anizotropię tego oddziaływania. W odróżnieniu od pracy [32], nasze wyniki nie wykazały silnej anizotropii w paśmie przewodnictwa, a jedynie w paśmie walencyjnym. Źródłem tej rozbieżności jest zastosowany funkcjonal wymiennokorelacyjny oraz związany z nim rozmiar przerwy pasmowej. W pracy [32] rozmiar przerwy był na poziomie 1 eV, podczas gdy przerwa energetyczna w naszych obliczeniach zbliżona była do wartości eksperymentalnej ~ 2 eV. Wpływ przerwy pasmowej na efektywne oddziaływanie SO w paśmie jest zrozumiały, gdyż efektywne oddziaływanie SO w paśmie n jest wynikiem oddziaływania tego pasma z innymi w tym samym punkcie k strefy Brillouina

$$\lambda_{so,n} \sim \sum_{m \neq n} \langle \psi_{n,\mathbf{k}} | H_{so} | \psi_{m,\mathbf{k}} \rangle / (E_n - E_m). \quad (7)$$

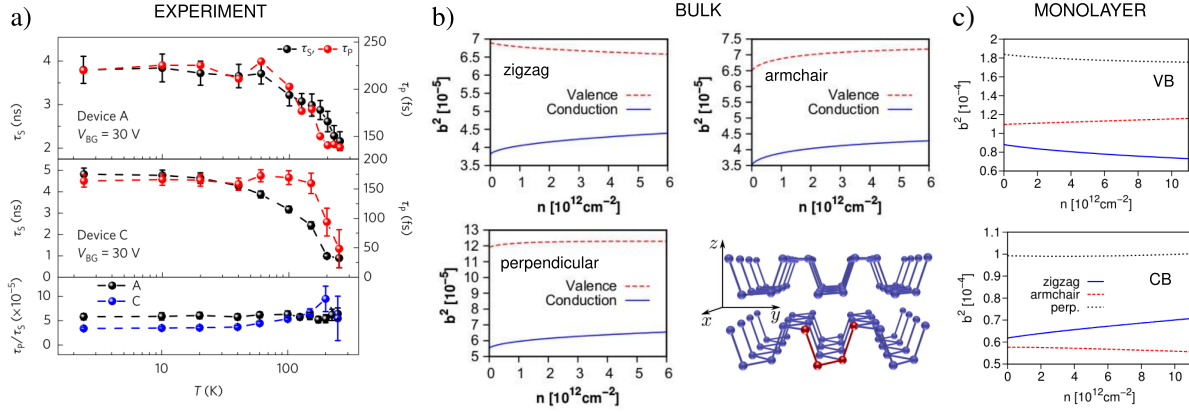
Z hamiltonianu (6) można wyprowadzić następującą postać pól spin-orbitalnych

$$\begin{aligned} \Omega_x^2 &= \frac{4(\alpha - \gamma)^2}{\hbar^2} \langle k_y \rangle^2 \\ \Omega_y^2 &= \frac{4(\alpha + \gamma)^2}{\hbar^2} \langle k_x \rangle^2, \end{aligned} \quad (8)$$

$\Omega^2 = \Omega_x^2 + \Omega_y^2$, przy użyciu których oszacowaliśmy czas rozpraszania spinu $\tau_{s,DP}$ dla różnych kierunków polaryzacji.

Otrzymane czasy relaksacji DP $\tau_{s,DP}$ są w przybliżeniu o rząd dłuższe od $\tau_{s,EY}$ (Rysunek 2 c),d)) wskazując na dominujący wkład mechanizmu EY do rozpraszania spinu w fosforenie. W odróżnieniu od $\tau_{s,EY}$ gdzie najdłuższe czasy relaksacji dla elektronów walencyjnych wykazuje polaryzacja w kierunku *zygzag*, dla mechanizmu DP najslabiej rozpraszane są spiny spolaryzowane w kierunku *fotel*. Dla elektronów przewodnictwa kierunki anizotropii τ_s są takie same dla obu mechanizmów.

W pracy **H1** rozważyliśmy także kilka scenariuszy eksperymentalnych porównując czasy relaksacji EY i DP dla różnych wartości poprzecznego pola elektrycznego E . Pokazaliśmy, że dla pól elektrycznych $E_z \leq 2$ V/nm oraz koncentracji nośników $n \leq 5 \cdot 10^{12}$ cm $^{-2}$ mechanizm EY ustala dolne ograniczenie na τ_s . Dla większych wartości n oraz E_z oba mechanizmy stają się jednakowo istotne. Trzeba jednak podkreślić, że pola poprzeczne o wartościach kilku V/nm są



Rysunek 3: Parametr mieszania spinu w czarnym fosforze. a) Eksperymentalne wyniki czasu rozpraszania pędu τ_p i czasu rozpraszania spinu τ_s oraz odpowiadająca im wartość $b^2 \sim \tau_p/\tau_s$. Identyczna zależność temperaturowa τ_p i τ_s wskazuje na mechanizm EY jako dominujący relaksację spinu. b) Parametr mieszania spinu b^2 w funkcji koncentracji nośników na podstawie obliczeń DFT dla próbki objętościowej i dla trzech osi kwantowania spinu: zygzak (x), fotel (y) i w kierunku prostopadłym do płaszczyzny 2D (z); c) To samo co na b) ale dla monowarstwy czarnego fosforu. Zadaptowane z prac H1 i H2.

bardzo silnymi polami wykraczającymi poza typowe wartości eksperymentalne [37].

Praca **H2** jest kontynuacją badań nad relaksacją spinu w czarnym fosforze. Wraz z grupą fizyków eksperymentalnych z Politechniki Federalnej w Lozannie (EPFL) i Narodowego Uniwersytetu Singapurskiego (NUS) badaliśmy relaksację spinu w wielowarstwowym czarnym fosforze. Badania eksperymentalne obejmowały elektryczne wprowadzanie, transport, precesję i detekcję spinu. Ze względu na dużą reaktywność chemiczną czarnego fosforu, w eksperymencie zwykle wykorzystuje się układy kilkuwarstwowe. Pozwala to na uzyskanie strukturalnie stabilnej próbki i zapewnia odpowiednio silną odpowiedź układu [38, 39]. W naszym przypadku badane były próbki o grubości 5 nm, co odpowiada około 9-10 monowarstwom. W geometrii nielokalnego zaworu spinowego zmierzono precesję spinową Hanle, przy ustalonym kierunku polaryzacji magnetyzacji wzdłuż brzegu *fotel* czarnego fosforu [kierunek y na Rys. 3 b)], z której uzyskano czas relaksacji spinu τ_s .

Rysunek 3 a) przedstawia wartości τ_s , τ_p w funkcji temperatury otrzymane w eksperymencie. Czasy relaksacji spinu są rzędu nanosekund, przy typowych wartościach $\tau_p = 0.1 - 0.2$ ps, co sugeruje słaby stopień rozpraszania spinu w czarnym fosforze. Jednocześnie, identyczna zmienność temperaturowa τ_s i τ_p wskazuje na mechanizm EY jako dominujący proces relaksacji spinu (patrz Równanie (1)), potwierdzając nasze teoretyczne przewidywania z pracy **H1**. Wartość parametru b^2 można odczytać ze stosunku τ_p/τ_s , przyjmując w Równaniu (1) $\alpha = 1$, co daje

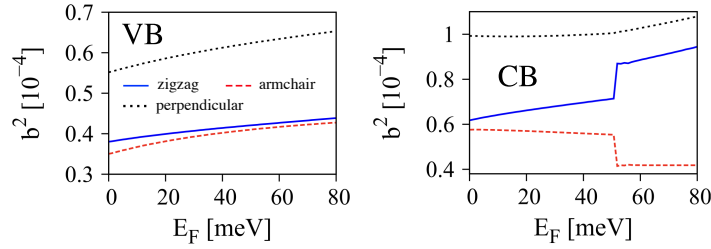
$b^2 \approx 5 \cdot 10^{-5}$, w dużym zakresie temperatur. Są to wartości mniejsze niż nasze oszacowania dla jednowarstwowego czarnego fosforu. Różnica ta może częściowo wynikać z odmienności pomiędzy próbkami teoretycznymi i eksperymentalnymi, ich strukturami pasmowymi oraz innymi wielkościami wykorzystywanymi do przeliczania nielokalnego oporu na czas życia spinu. Postanowiliśmy jednak zbadać parametr mieszania spinu b^2 w układzie bardziej zbliżonym do próbki eksperymentalnej niż monowarstwa z uwagi na wyjątkowo silną zależność przerwy pasmowej czarnego fosforu E_g od liczby warstw N , $E_g \sim E_{1L}/N^{0.7}$ [28]. Dla 10 warstw przerwa pasmowa wynosi przybliżeniu 0.39 eV co odpowiada już praktycznie wartości przerwy w próbce objętościowej 0.33 eV [40]. Uznaliśmy zatem za uzasadnione przeprowadzenie obliczeń numerycznych dla objętościowego czarnego fosforu. Podobnie jak dla monowarstwy, w obliczeniach numerycznych DFT zastosowaliśmy podejście obliczeniowe LDA+mBJ [34] przyjmując parametryzację potencjału mBJ pozwalającą na odtworzenie eksperymentalnej przerwy pasmowej $E_g \approx 0.338$ eV.

Wyniki obliczeń parametru b^2 zawarte w pracy **H2** pokazują, że wartości b^2 dla elektronów przewodnictwa próbki objętościowej (Rysunek 3 b)), są około półtora razy mniejsze niż dla jednej warstwy (Rysunek 3 c)), i pozostają w bardzo dobrej zgodzie z wynikami eksperymentalnymi. Wynik ten wskazuje na dobrą dokładność obliczeń DFT w opisie oddziaływania SO w czarnym fosforze.

W pracy **H3** dokonaliśmy dokładniejszego porównania rozpraszania spinu pomiędzy monowarstwą (fosforenem) a objętościowym czarnym fosforem. Stanowi ona uzupełnienie prac **H1** i **H2** o przypadki silnego domieszkowania. Pokazaliśmy, że w próbce objętościowej zależność b^2 od poziomu Fermiego jest praktycznie nieistotna. W przedziale poziomu Fermiego 0-80 meV (znacznie większym niż rozważany w pracy **H2**) mierząc od brzegu pasma, parametr b^2 zmienia się w zakresie mniejszym niż 20%. Wynika to bezpośrednio ze struktury pasmowej w pobliżu przerwy pasmowej: wkład w kontur Fermiego daje tylko jedno pasmo dobrze odseparowane energetycznie od pozostałych w całym zakresie zmian poziomu Fermiego. Można zatem z dobrym przybliżeniem stwierdzić, powołując się na perturbacyjny charakter oddziaływania SO, że efektywne sprzężenie SO w tych pasmach $\lambda_{so}^{eff} = const.$ w całym zakresie rozważanych energii.

W monowarstwie struktura pasmowa w pobliżu brzegów pasma jest znacznie bogatsza, szczególnie w paśmie przewodnictwa. Skutkuje to silniejszym efektywnym oddziaływaniem SO w pasmach w pobliżu przerwy oraz bardziej skomplikowanym konturem Fermiego, który może wpływać na wartość średniego b^2 . W pracy **H3** pokazaliśmy, że około 50 meV od brzegu pasma przewodnictwa pojawia się kolejne pasmo, którego brzeg znajduje się w znacznej odległości od centrum strefy. Oddziaływanie SO w tym paśmie jest inne niż w konturze wokół punktu Γ co jest odzwierciedlone w wartościach b^2 - gdy poziom Fermiego osiąga brzeg drugiego pasma obserwujemy nieciągłą zmianę b^2 dla osi kwantowania w płaszczyźnie fosforenu (Rys. 4).

Nasze wyniki uwypuklają wpływ skomplikowanej natury oddziaływania SO w strukturze pasmowej wynikającej z symetrii i topologii pasm na parametr b^2 . W pracy **A3** pokazaliśmy, że zmiany topologii pasm wywołane naprężeniem mogą odwrócić anizotropię parametru b^2 . Co



Rysunek 4: Parametr mieszania spinu b^2 w fosforenie w funkcji poziomu Fermiego E_F dla pasma walencyjnego (VB) oraz przewodnictwa (CB). Zaadaptowane z pracy H3.

więcej, dla naprężenia rozciągającego o wartości ok. 1.2% i złamanej symetrii inwersji pasmo przewodnictwa wykazuje trwałą teksturę spinową, co skutecznie eliminuje mechanizm DP dla wybranego kierunku spinu. Pracy tej habilitant nie zawarł w cyklu prac składających się na osiągnięcie naukowe, mimo stworzenia koncepcji pracy i czynnego wkładu w jej tworzenie. Będzie ona stanowiła część dorobku do rozprawy doktorskiej pierwszego autora, którego habilitant jest promotorem pomocniczym.

4.2.2 Oddziaływanie SO jednoelementowych materiałach 2D

Wyniki prac **H1-H3** skłoniły habilitanta do rozszerzenia badań nad oddziaływaniem SO w materiałach 2D. W pracy **H4** zbadaliśmy efekty relatywistyczne oraz parametr mieszania spinu b^2 w materiałach grupy 14 i 15 układu okresowego. Badania rozpoczęliśmy od grafenu, który jest jedynym materiałem 2D o tak dobrze zbadanych właściwościach.

Znikome oddziaływanie SO w grafenie [41, 42] w połączeniu z symetrią odbicia lustrzanego sieci względem płaszczyzny σ_h pozwala na efektywny opis oddziaływania SO w pasmach Diraca hamiltonianem [43]

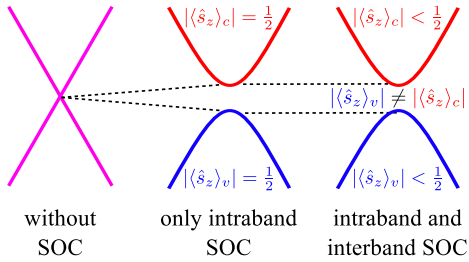
$$H_{so} = \alpha \tau_z \sigma_z S_z. \quad (9)$$

Stany własne hamiltonianu (9) są stanami własnymi operatora spinu S_z o wartościach własnych $\pm \hbar/2$, wobec czego parametr mieszania spinu $b^2 = 0$. Wynik ten można uzasadnić obecnością płaszczyzny odbicia lustrzanego σ_h sieci grafenu, która narzuca $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$. Wynik ten można zinterpretować następująco: ponieważ spin nie może odchylić się od osi kwantowania (z), jego długość jest zachowana, z czego wynika $b^2 = 0$.

Wyniki przeprowadzonych przez nas obliczeń numerycznych parametru b^2 wskazywały jednak na $b^2 \neq 0$. Uzyskane wartości parametru b^2 były rzędu 10^{-7} , co w świetle argumentów symetrii przedstawionych powyżej wzbudziło nasze podejrzenia, szczególnie że tak mała liczba może sugerować problem numerycznej precyzji. Warto w tym punkcie nadmienić, że $b^2 \neq 0$

wzbudziło także wątpliwości wśród naukowców zajmujących się oddziaływaniem SO w grafenie. Uznaliśmy więc, że potrzebna jest głębsza analiza problemu na poziomie bardziej fundamentalnym.

W pracy **H4** pokazaliśmy, że mieszanie spinu w pasmach grafenu jest możliwe bez łamania wewnętrznych symetrii. Używając wielopasmowej teorii $k \cdot p$ pokazaliśmy, że wewnątrzpasmowe oddziaływanie SO pomiędzy pasmami stożka Diraca (o nieredukowalnych reprezentacjach Γ^5), otwiera przerwę spin-orbitalną, lecz nie prowadzi do mieszania spinu. Wkład do b^2 pochodzi od elementów macierzowych $\langle \Gamma^5 | H_{so} | \Gamma^{1v/6v} \rangle$ hamiltonianu SO, gdzie stany *ket* reprezentują niżej położone pasma zbudowane z orbitali $p_{x/y}$ węgla, co schematycznie przedstawia Rysunek 5.



Rysunek 5: Schematyczne przedstawienie efektów wewnątrzpasmowego (intraband) oraz międzypasmowego (interband) oddziaływania SO w pasmach Diraca w grafenie. Rysunek z pracy H4.

Efekt mieszania spinu jest więc możliwy do zaobserwowania tylko w przypadku modeli wielopasmowych, a jego interpretacja jest następująca: w modelach wielopasmowych z międzypasmowymi oddziaływaniami pomiędzy spinowymi stopniami swobody, takimi jak oddziaływanie SO, spin w pojedynczym paśmie nie jest już wielkością zachowaną (ani dobrą liczbą kwantową). Mieszanie spinu objawia się redukcją $\langle S_z \rangle$, przy czym $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$ - pojawienie się mechanizmu mieszania spinu respektuje wszystkie symetrie grafenu. Dodatkowo, analiza stanów własnych efektywnego hamiltonianu pokazała, że oddziaływanie SO w górnym i dolnym stożku Diraca jest co do zasady anizotropowe, ponieważ pochodzi od sprzężeń z innymi pasmami

$$\begin{aligned}
 |\psi \uparrow\rangle_c &= \alpha |\Gamma_5^- \uparrow\rangle + \beta |\Gamma_{1v} \downarrow\rangle \\
 |\psi \downarrow\rangle_c &= \alpha |\Gamma_5^+ \downarrow\rangle + \beta |\Gamma_{1v} \uparrow\rangle \\
 |\psi \uparrow\rangle_v &= \lambda |\Gamma_5^+ \uparrow\rangle + \eta |\Gamma_{6v}^- \downarrow\rangle \\
 |\psi \downarrow\rangle_v &= \lambda |\Gamma_5^- \downarrow\rangle + \eta |\Gamma_{6v}^+ \uparrow\rangle.
 \end{aligned} \tag{10}$$

Wyznaczone w obliczeniach DFT wartości średniego b^2 w rozpatrywanym zakresie energii ± 100 meV, licząc od punktu neutralności ładunkowej wynoszą $b^2 \sim 10^{-7}$ (dla osi kwantyzacji w kierunku z) i nie zależą od położenia poziomu Fermiego. Wartości te nie są zaskakujące biorąc pod uwagę słabe oddziaływania SO w atomach węgla, około 10 meV [41], oraz dużą różnicę energii, około 10 eV, między pasmami Γ^5 oraz $\Gamma^{1v/6v}$ odpowiedzialnymi za mieszanie spinu. W praktycznych rozważaniach, efekt mieszania spinu w grafenie jest więc zanedbywalnie mały, co utrzymuje stosowalność hamiltonianu (9). Niemniej jednak, nasz wynik wskazuje na fundamentalnie inny obraz oddziaływania SO w grafenie niż powszechnie przyjęty.

Podobny obraz oddziaływania SO i mieszania spinu zachodzi w dwuwymiarowych dichalko-

genkach metali przejściowych o strukturze 1H, która również jest symetryczna względem płaszczyzny odbicia σ_h . W układach tych mieszanie spinu nie było dotąd uwzględniane. W pracy **A8** pokazaliśmy, że efekt ten może być istotny i jest silnie zależny od naprężenia sieci.

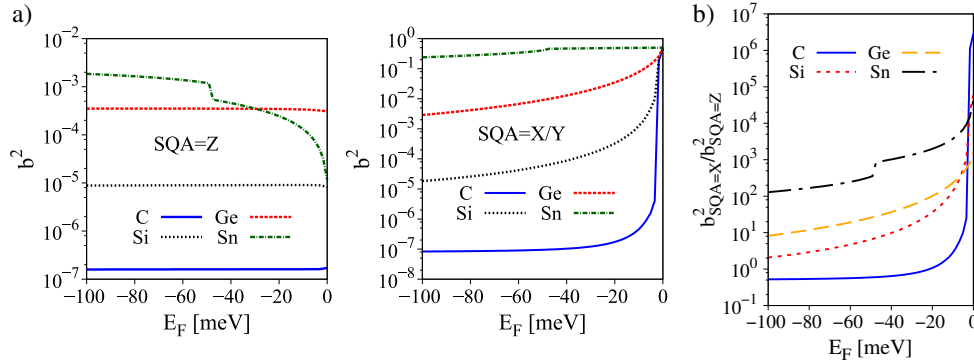
W pracy **H4** parametr b^2 obliczyliśmy dla wszystkich rozważanych w pracy materiałów. Pokazaliśmy, że cechuje się on silną anizotropią, która wynika bezpośrednio z symetrii sieci. Wszystkie badane materiały mają strukturę plastra miodu o symetrii sieci przynajmniej D_{3d} . Obecność osi obrotu C_3 , będącej elementem grupy D_{3d} , wymusza preferowany kierunek kwantyzacji spinu prostopadle do płaszczyzny materiału. Skutkuje to pojawieniem się w punktach wysokiej symetrii tzw. *spinowo gorących regionów* (ang. *spin hot spots*) [25], w których $b^2 \approx 1$ dla osi kwantowania (SQA) w kierunkach x i y (Rysunek 6 a)). Ponieważ dla osi kwantowania w kierunku $z \parallel C_3$, $b^2 \ll 1$, obserwujemy gigantyczną anizotropię parametru b^2 względem wyboru osi kwantowania. W przypadku monowarstwy ołowiu (stanenu) anizotropia osiąga realne wartości rzędu $10^2 - 10^3$ dla poziomu Fermiego $E_F \leq 20$ meV mierząc od punktu neutralności ładunkowej (Rysunek 6 b)).

Analogiczne wyniki otrzymaliśmy dla materiałów z grupy 15 układu okresowego. Różnice pomiędzy materiałami zbudowanymi z pierwiastków 14 i 15 grupy wynikają z obecności dodatkowego elektronu walencyjnego w tych drugich. Dodatkowy elektron wypełnia górne pasmo stożka Diraca (pasmo przewodnictwa dla materiałów z grupy 14) i przesuwają je poniżej poziomu Fermiego. Wskutek tego spinowo gorący region o silnej anizotropii b^2 przesuwa się z punktu K do Γ .

Warto w tym punkcie nadmienić, że dla materiałów Diraca obliczenia średniego b^2 wymagają dużej precyzji obliczeń. Liniowa relacja dyspersyjna prowadzi do szybkiej redukcji konturu Fermiego podczas zbliżania się do punktu neutralności ładunkowej, co pociąga za sobą wymóg dużego zagęszczenia siatki k -punktów. W przypadku grafenu dobrą zbieżność wyników b^2 uzyskaliśmy próbując otoczenie K-punktu liczbą około 40 tys. k -punktów, pomimo całkowania interpolacyjną metodą tetrahedron [44].

Wyznaczone przez nas numerycznie wartości b^2 mogą być łatwo przełożone na czas relaksacji spinu τ_s^{EY} . Należy jednak zachować ostrożność w stosowaniu wzoru (1) dla materiałów o silnym sprzężeniu SO, takich jak na przykład *stanene*, dla których perturbacyjny limit stosowalności wzoru (1) nie jest spełniony dla osi kwantowania leżącej w płaszczyźnie materiału.

Obliczenia DFT oddziaływania SO i parametru mieszania spinu przeprowadzone w pracy **H4** pozwoliły nam także szerzej spojrzeć na zagadnienie skalowania oddziaływania SO w kryształach 2D. Pokazaliśmy (Rysunek 7 a)), że zależność siły wewnętrznego oddziaływania SO $\lambda_{so} \sim \Delta_{so}$ od liczby atomowej Z , jest dobrze opisana funkcją kwadratową, $\lambda_{so} \sim Z^2$, podobnie jak to ma miejsce dla elektronów walencyjnych w izolowanych atomach [45]. Ponadto, w pasmach wolnych od wpływu przypadkowych (bądź wynikających z symetrii) degeneracji prowadzących do pojawienia się spinowo gorących regionów (*spin hot spots*) parametr mieszania spinu skaluje się



Rysunek 6: Parametr mieszania spinu b^2 w paśmie walencyjnym w funkcji poziomu Fermiego E_F i różnych osi kwantowania SQA dla materiałów jednoelementowych z grupy 14 układu okresowego (a). (b) Anizotropia b^2 wyznaczona na podstawie wartości b^2 z (a).

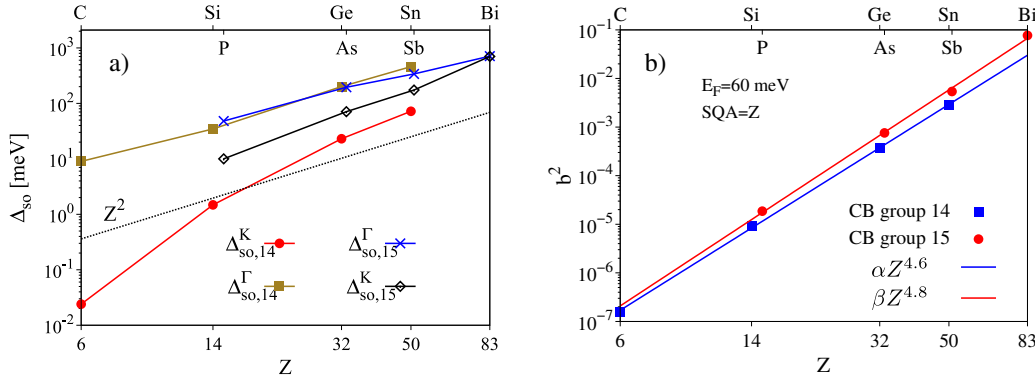
w przybliżeniu jak $b^2 \sim \lambda_{so} \sim Z^4$ (Rysunek 7 b)). Stosując metodę dopasowania najmniejszych kwadratów otrzymaliśmy następujące wartości wykładników: $b^2 \sim Z^{4.6}$ i $b^2 \sim Z^{4.8}$ dla materiałów, odpowiednio, z 14 i 15 grupy układu okresowego).

4.2.3 Oddziaływanie SO i relaksacja spinu w jednowarstwowym PtSe₂

W pracy **H5** dokonaliśmy charakteryzacji oddziaływania SO oraz relaksacji spinu w pojedynczej warstwie PtSe₂. Jednowarstwowy PtSe₂ to półprzewodnikowy dichalkogenek metalu przejściowego, charakteryzujący się pośrednią przerwą energetyczną oraz wysoką ruchliwością nośników, na poziomie podobnym do fosforenu [46]. Zarówno forma objętościowa, jak i monowarstwa PtSe₂ krystalizują w centrosymetrycznej strukturze $P3\bar{m}1$ izomorficznej z grupą punktową D_{3d} . Obecność symetrii inwersji automatycznie sugeruje, że podobnie jak w czarnym fosforze, mechanizm EY będzie dominującym mechanizmem relaksacji.

W pracy **H5** pokazaliśmy, że natura relaksacji spinu w PtSe₂ jest jednak bardziej skomplikowana. Wynika to z silnego oddziaływania SO w pasmach zlokalizowanych w okolicy przerwy energetycznej. Otrzymane wartości przerw spin-orbitalnych w punktach wysokiej symetrii są rzędu 50-350 meV. Zgodnie z przewidywaniami, silne oddziaływanie SO w PtSe₂ prowadzi do znacznego mieszania spinu. Nasze obliczenia pokazują, że w paśmie przewodnictwa $b^2 \sim 10^{-2}$ niezależnie od wyboru kierunku osi kwantowania (Rysunek 8). Brak anizotropii b^2 wynika w tym przypadku z lokalizacji brzegu pasma przewodnictwa. Znajduje się ono w obszarze strefy Brillouina o niskiej symetrii i jest dobrze izolowane energetycznie od innych pozostałych pasm, dzięki czemu jest ono wolne od spinowo gorących obszarów.

Brzeg pasma walencyjnego PtSe₂ zlokalizowany jest w punkcie Γ pierwszej strefy Brillouina. Podobnie jak w materiałach omówionych w rozdziale 4.2.2, symetria obrotu C_3 w sieci PtSe₂



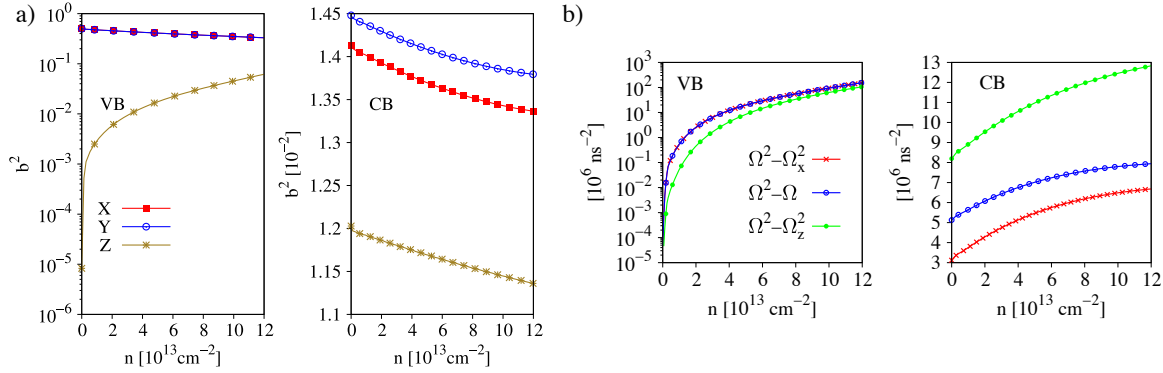
Rysunek 7: Zależność efektów spin-orbitalnych od liczby atomowej Z dla badanych materiałów z grupy 14 i 15 układu okresowego. (a) rozszczepienie spinowo-orbitalne Δ_{so} w punktach Γ oraz K pierwszej strefy Brillouina. (b) Parametr b^2 dla osi kwantowania w kierunku prostopadłym do płaszczyzny materiału. Punkty oznaczają wartości z obliczeń DFT, linie reprezentują wartości funkcji analitycznej $b^2 = \alpha Z^n$ dopasowanej do danych numerycznych. Rysunek zaadaptowany z pracy H4.

narzuca, aby kierunek spinu w punkcie Γ był prostopadły do płaszczyzny materiału. W konsekwencji, b^2 w bliskim sąsiedztwie centrum pierwszej strefy Brillouina przyjmuje małe wartości dla osi kwantowania w kierunku z , przy jednoczesnym maksymalnym zmieszaniu spinów dla osi kwantowania w kierunku x/y , patrz Rysunek 8. W efekcie obserwujemy znaczną i zależną od koncentracji nośników anizotropię parametru b^2 .

Na podstawie wartości b^2 oszacowaliśmy czas relaksacji spinu τ_s . W paśmie walencyjnym i osi kwantowania w kierunku x/y (Rysunek 8)), $b^2 \approx 1$, co wykracza poza perturbacyjny limit stosowalności wzoru (1). Wobec tego czas relaksacji spinu ograniczony jest czasem relaksacji pędu, który według naszych oszacowań jest na poziomie $\tau_p \approx 80$ fs. Dla osi kwantowania w kierunku z , oraz w paśmie przewodnictwa dla wszystkich kierunków osi kwantowania $b^2 \approx 10^{-2}$. Oszacowany przy użyciu wzoru (4) czas relaksacji jest znacznie dłuższy, $\tau_s^{EY} \approx 10$ ps.

W pracy **H5** zbadaliśmy także zewnętrzne oddziaływanie SO, które aktywowaliśmy poprzez przyłożenie poprzecznego pola elektrycznego, analogicznie do pracy **H1**. Na podstawie obliczeń wyznaczyliśmy tekstury spinowe oraz amplitudy pól spin-orbitalnych, które pozwoliły nam scharakteryzować mechanizm relaksacji DP.

W mechanizmie DP również możemy wyróżnić dwa reżimy relaksacji. Dla pól elektrycznych $E \leq 3$ V/nm obowiązuje reżim zwężenia ruchowego $\tau_p \Omega \ll 1$. W tym reżimie, dla elektronów walencyjnych zaobserwowaliśmy znaczny komponent S_z w teksturze spinowej w okolicach środka strefy Brillouina. Prowadzi to do zmniejszenia amplitudy pola spin-orbitalnego prostopadłego do kierunku z , $\Omega_{\perp,z}^2 = \langle \Omega^2 - \Omega_z^2 \rangle$ (Rysunek 8 b)), a tym samym do stabilizacji składowej spinu S_z . Jednocześnie, wzmocniona składowa Ω_z daje przyczynek do dehokerecji składowych S_x



Rysunek 8: Relaksacja spinu w jednowarstwowym PtSe₂: (a) Parametr mieszania spinu b^2 dla pasma walecyjnego (VB) oraz pasma przewodnicwa (CB) jednowarstwowego PtSe₂ w funkcji koncentracji nośników dla trzech kierunków osi kwantowania spinu; (b) Średnie wartości kwadratów składowych pól spin-orbitalnych $\Omega^2_{\perp,i} = \Omega^2 - \Omega_i^2$. Rysunek zaadaptowany z pracy **H5**.

i S_y , co prowadzi do silnej anizotropii rozpraszania spinu. Dla rozważanej koncentracji nośników anizotropia ta zmienia się w zakresie $\tau_{s,DP}^z/\tau_{s,DP}^{x/y} \in [0.1, 0.7]$ dla rozważanej koncentracji nośników. Dla pola $E=2 \text{ V/nm}$ otrzymaliśmy $\tau_{s,DP}^z \sim 40 \text{ ps}$ i $\tau_{s,DP}^{x/y} \sim 10 \text{ ps}$. Dla dużych amplitud pól elektrycznych limit stosowalności wzoru (5) jest przekroczony i czas dekoherencji spinu determinowany jest czasem τ_p .

Dla elektronów przewodnictwa obserwujemy odwrócenie kierunku anizotropii (Rysunek 8 b)). Według naszych obliczeń składowa spinu S_z powinna relaksować około dwukrotnie szybciej od składowych S_x oraz S_y .

Wyniki zawarte w pracy **H5** możemy podsumować następująco. Wewnętrzne i zewnętrzne oddziaływanie SO w PtSe₂ są na podobnym poziomie intensywności. Ich wzajemne oddziaływanie przejawia się w porównywalnym wkładzie do czasu życia spinu, który według naszych przewidywań jest krótki – rzędu 1-10 ps i w znacznym stopniu zależy od czasu relaksacji pędu. Wskazaliśmy także, że pojawiająca się anizotropia rozpraszania spinu może być użyta do rozróżnienia mechanizmu relaksacji EY/DP od magnetycznych domieszek, gdyż w przypadku tych ostatnich relaksacja spinu jest izotropowa [16].

4.2.4 Parametr mieszania spinu w nadprzewodnikach Isinga typu II-go

Pracą zamykającą część poświęconą badaniu wewnętrznego oddziaływania SO oraz parametru b^2 jest praca **H6**. Stanowi ona połączenie naszej dotychczasowej wiedzy dotyczącej parametru mieszania spinu z nowymi zjawiskami fizycznymi, w kontekście których nie był on wcześniej rozpatrywany. Proponujemy w niej nową metodologię poszukiwania nadprzewodników Isinga

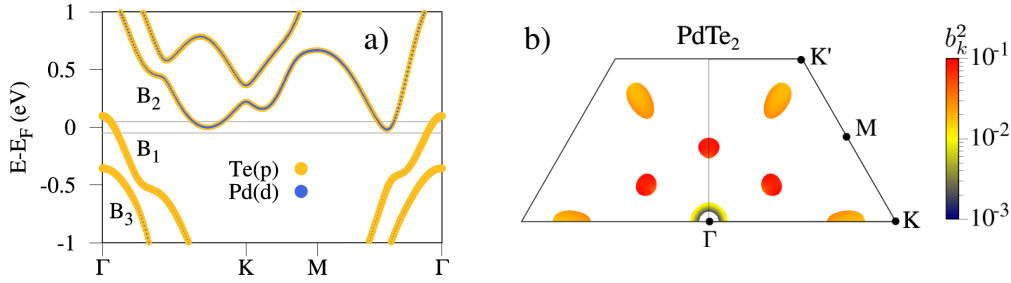
typu II. Metoda została oryginalnie stworzona do zastosowania w obliczeniach DFT, jednak z łatwością może zostać zaimplementowana np. w modelach ciasnego wiązania. Prosta implementacja bazująca jedynie na znajomości wektorów własnych hamiltonianu pozwala na użycie tej metody do przesiewowego poszukiwania materiałów z potencjalnym parowaniem Isinga. Wyniki naszych obliczeń numerycznych wykazują dobrą zgodność z wynikami eksperymentalnymi, co demonstuje skuteczność zaproponowanej metody.

Nadprzewodniki Isinga charakteryzują się bardzo wysokimi wartościami górnego pola krytycznego, znacznie przekraczającymi limit Pauliego [47, 48]. Odporność na działanie zewnętrznych pól magnetycznych ma swoje źródło w silnym oddziaływaniu SO, które stabilizuje spinową polaryzację pasm w kierunku prostopadłym do płaszczyzny materiału i zewnętrznego pola magnetycznego [49, 50, 51].

Wyróżnić możemy dwa rodzaje nadprzewodników Isinga: I-go oraz II-go rodzaju. Nadprzewodniki Isinga I-go rodzaju, takie jak 1H NbSe₂ [50] lub MoSe₂ [49], posiadają poziomą płaszczyznę lustrzaną σ_h , która chroni polaryzację spinową pasm w kierunku prostopadłym dzięki silnemu wewnętrznemu polu spin-orbitalnemu B_{so} skierowanemu w tym kierunku. Amplituda B_{so} może być odczytana z energii rozszczepienia spinowego pasm, $2\Delta_{so}^{\uparrow\downarrow} = \mu_B B_{so}$, które jest efektem braku symetrii inwersji struktury. Gdy zewnętrzne pole magnetyczne $B_{\parallel}$, równoległe do płaszczyzny materiału, osiąga wartość krytyczną $B_{c2,\parallel}$ taką, że stosunek $B_{eff,\parallel} = B_{\parallel}^2/B_{so}$ osiąga limit Pauliego $B_{eff,\parallel} \sim B_P \approx 1.84 T_C$, nadprzewodnictwo ulega zniszczeniu [50]. Wartość $B_{c2,\parallel}$ nazywana jest górnym polem krytycznym.

Nadprzewodnictwo Isinga II-rodzaju zostało zaobserwowane w materiałach centrosymetrycznych z wielokrotnie zdegenerowanymi orbitalami, takimi jak odmiana 1T PdTe₂ lub jednowarstwowy ołów (ang. stanene) [52, 51, 53] o symetrii D_{3d} . Parowanie Isinga zachodzi tu poprzez mechanizm tzw. blokady spinowo-orbitalnej (ang. *spin-orbital locking*), w której oddziaływanie SO rozszczepia zdegenerowane orbitale $p_{x/y}$ zlokalizowane wokół punktu Γ pierwszej strefy Brillouina na dwa energetycznie różne dublety $(p_+^{\uparrow}, p_-^{\downarrow})$ i $(p_+^{\downarrow}, p_-^{\uparrow})$, $p_{\pm} = p_x \pm ip_y$. Poprzeczny do płaszczyzny materiału kierunek polaryzacji spinowej w punkcie Γ jest gwarantowany przez obecność osi obrotu C_3 , natomiast amplituda B_{so} jest determinowana przez rozmiar przerwy spin-orbitalnej Δ_{so} , którą można odczytać ze struktury pasmowej.

Sytuacja komplikuje się jednak, gdy kontur Fermiego uczestniczący w parowaniu nadprzewodzącym znajduje się zdaleka od centrum strefy Brillouina. Po pierwsze, brak symetrii odbicia σ_h struktury krystalicznej nadprzewodników Isinga typu II powoduje, że składowa spinu S_z nie jest już chroniona, więc $\langle S_x \rangle$ i $\langle S_y \rangle$ mogą przyjmować skończone wartości. Po drugie, degeneracja spinowa pasm nie pozwala w prosty sposób zidentyfikować kierunku polaryzacji spinowej poprzez obliczenie wartości oczekiwanych $\langle S_i \rangle$ w paśmie, gdyż w stanach zdegenerowanych dowolna ich kombinacja liniowa także jest równouprawnionym rozwiązaniem o tej samej energii. Zatem wartości $\langle S_i \rangle$ w danym paśmie mogą zmieniać się losowo pomiędzy k -punktami w zależności od



Rysunek 9: Własności elektronowe i spinowe monowarstwy PdTe_2 . (a) Struktura pasmowa monowarstwy wraz z charakterem orbitalnym pasm. Rozszczepione przez oddziaływanie SO dublety oznaczone są przez B_1 oraz B_3 . Linie poziome oznaczają przedział energii Fermiego $E_F \pm 50 \text{ meV}$ uwzględniony w analizie paraowania Isinga. (b) Wartości parametru $b_{\mathbf{k}}^2$ w kieszeniach Fermiego dla rozważanego zakresu energii wskazanego na (a). Rysunek zaadaptowany z pracy **H6**.

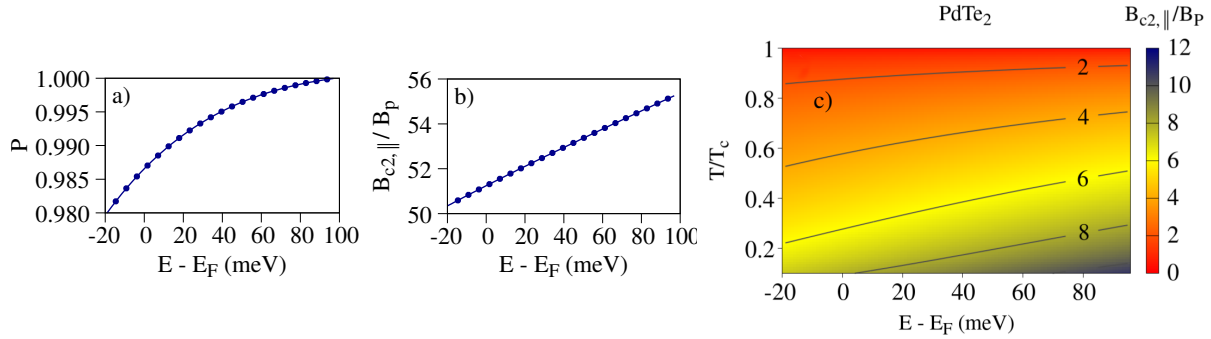
wybranych przez program współczynników kombinacji liniowej. Fakt ten stwarza trudności w poszukiwaniu nadprzewodników Isinga typu II metodami teoretycznymi.

W pracy **H6** proponujemy rozwiązanie tego problemu w oparciu o parametr b^2 , a dokładniej o jego anizotropię. Jako miarę anizotropii b^2 definiujemy polaryzację P wyrażoną przez wartości parametru $b_{\hat{s}}^2$ obliczone dla różnych osi kwantyzacji spinu $\hat{s} = \{x, y, z\}$

$$P = \frac{b_{\parallel}^2 - b_{\perp}^2}{b_{\parallel}^2 + b_{\perp}^2}, \quad (11)$$

gdzie $b_{\parallel}^2 = (b_x^2 + b_y^2)/2$ i $b_{\perp}^2 = b_z^2$. Parametr $P \in [-1, 1]$ pozwala w prosty sposób wyrazić kierunek polaryzacji spinowej zdegenerowanych pasm. Dla $P = 1$ polaryzacja spinowa pasm jest prostopadła do płaszczyzny materiału; dla $P = -1$ kierunek polaryzacji leży w płaszczyźnie materiału, a dla $P = 0$ parametr b^2 nie wykazuje anizotropii. W nadprzewodnikach Isinga wewnętrzne pola spin-orbitalne skierowane są prostopadle do płaszczyzny materiału, dlatego interesuje nas przypadek $P \approx 1$. Kierunek polaryzacji w płaszczyźnie materiału nie jest istotny, zatem może być uwzględniony jako wartość uśredniona $b_{\parallel}^2$.

Do pełnego opisu paraowania Isinga, oprócz wyznaczenia polaryzacji P , potrzebna jest także amplituda efektywnego pola magnetycznego Zeemana (pola spin-orbitalnego) B_{so} . W nadprzewodnikach Isinga I-go rodzaju jest ona proporcjonalna do amplitudy rozszczepienia spinowego pasm, $B_{\text{so}} \sim \Delta_{\text{so}}^{\uparrow\downarrow}$, ponieważ pole spin-orbitalne ma tylko jedną składową $\mathbf{B}_{\text{so}} = (0, 0, B_z)$. W nadprzewodnikach II-go rodzaju symetria nie zabrania istnienia pozostałych składowych pola $\mathbf{B}_{\text{so}}$ poza punktem Γ , dlatego przyjmujemy, że wewnętrzne pole spin-orbitalne ma wszystkie składowe niezerowe $\mathbf{B} \equiv \mathbf{B}_{\text{so}} = (B_x, B_y, B_z) = (B_{\parallel}, B_{\perp})$. Podobnie jak dla parametru P , składowe pola równoległe do płaszczyzny materiału potraktowaliśmy efektywnie $B_{\parallel} = \sqrt{B_x^2 + B_y^2}$,



Rysunek 10: Charakterystyka parowania Isinga w PdTe₂ na podstawie zaproponowanego modelu. a) Wartość polaryzacji spinowej pasma B_3 w funkcji poziomu Fermiego. (b) Górne pole krytyczne $B_{c2,||}$ w temperaturze 0K. (c) Górne pole krytyczne $B_{c2,||}$ w funkcji poziomu Fermiego w skończonych temperaturach. Rysunek zaadaptowany z pracy H6.

gdyż tylko $B_{\perp} = B_z$ wnosi wkład do polaryzacji pasm w kierunku z .

Amplituda pola $\mathbf{B}$ związana jest z rozszczepieniem spinowo-orbitalnym dubletów zależnością $\Delta_{so} = 2\mu_B \sqrt{B_{\parallel}^2 + B_{\perp}^2}$, przy czym wkład do górnego pola krytycznego pochodzi jedynie od $B_{\perp}$. Należy zatem wyodrębnić z Δ_{so} część pochodzącą tylko od $B_{\perp}$. Mając na uwadze, że kierunek polaryzacji spinowej pasm P wyznaczony jest przez kierunek $\mathbf{B}$, możemy wyrazić jego składowe jako funkcję P oraz Δ_{so}

$$B_{\parallel} = \frac{B}{\sqrt{2}\sqrt{1+P^2}} (1-P) = \frac{\Delta_{so}}{2\mu_B} \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{1+P^2}} (1-P), \quad (12)$$

$$B_{\perp} = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{1+P^2}} (1+P) = \frac{\Delta_{so}}{2\mu_B} \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{1+P^2}} (1+P), \quad (13)$$

Poza punktami wysokiej symetrii, stany orbitalne tworzące dublety z reguły nie są zdegenerowane bez obecności oddziaływania SO. W takim przypadku Δ_{so} wyraziliśmy jako różnicę odległości pasm z włączonym oddziaływaniem SO, $\Delta_{n,m}^{\text{rela}}$, i bez tego oddziaływania, $\Delta_{n,m}^{\text{nrel}}$

$$\Delta_{so} = \Delta_{n,m}^{\text{rela}} - \Delta_{n,m}^{\text{nrel}}. \quad (14)$$

Z wartości $B_{\perp}$ możemy już oszacować górne pole krytyczne wg wzoru $B_{c2,||} \sim \sqrt{B_p B_{\perp}}$ [50].

Zaproponowany model zastosowaliśmy do trzech jednowarstwowych centrosymetrycznych materiałów o symetrii D_{3d} . Są to fazy 1T TMDC: PdTe₂, NbTe₂ oraz TiSe₂. W pierwszym z materiałów nadprzewodnictwo Isinga zostało potwierdzone eksperymentalnie, dlatego materiał ten służył nam jako punkt odniesienia oraz test naszego modelu. Z tego względu materiał ten omówimy bardziej szczegółowo.

W pierwszym kroku wyznaczyliśmy w obliczeniach DFT wartości parametru P w zakresie

± 50 meV od poziomu Fermiego. Pozwoliło to wydzielić ze skomplikowanej powierzchni Fermiego PdTe₂ (Rys. 9 b)) kieszenie, dla których $P \approx 1$. Zgodnie z oczekiwaniami, wyniki wskazały kieszeń wokół centrum strefy Brillouina (pasmo B_1 na Rysunku 9 a)) jako potencjalnie wykazującą parowanie Isinga. Pasmo B_1 charakteryzuje silna anizotropia parametru b^2 na poziomie $b_{\parallel}^2/b_{\perp}^2 \approx 100$ -300. Tak duża anizotropia b^2 przekłada się na wartości $P \geq 0.98$ (Rysunek 10 a)). Silne sprzężenie SO w PdTe₂ manifestuje się rozszczepieniem spin-orbitalnym $\Delta_{so} \sim 400$ meV pomiędzy dubletami B_1 i B_2 . Odpowiadające tym wartościom amplitudy pola spin-orbitalnego $B_{\perp} \sim 10^3$ T, co pozwala oszacować górne pole krytyczne na poziomie $B_{c2,\parallel}(0K) \approx 50B_P$. Należy jednak nadmienić, że powyższa wartość $B_{c2,\parallel}$ dotyczy temperatury 0K.

Aby otrzymać oszacowania $B_{c2,\parallel}$ w skończonych temperaturach, zastosowaliśmy mikroskopowy jednopasmowy model nadprzewodnictwa zaproponowany w pracy [54]

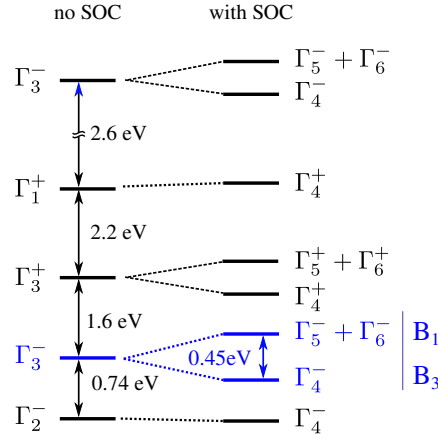
$$\ln\left(\frac{T}{T_c}\right) + \frac{\mu_B^2 B_{c2,\parallel}}{\widetilde{\beta}_{SO}^2 + \mu_B^2 B_{c2,\parallel}} \operatorname{Re} \left[\psi \left(\frac{1}{2} + \frac{i\sqrt{\widetilde{\beta}_{SO}^2 + \mu_B^2 B_{c2,\parallel}}}{2\pi k_B T} \right) - \psi \left(\frac{1}{2} \right) \right] = 0, \quad (15)$$

gdzie T_c jest temperaturą krytyczną, $\widetilde{\beta}_{SO} = B_{\perp} / \left(1 + \frac{\hbar}{2\pi k_B T_c \tau_0} \right)$, $\tau_0 = 7.25$ fs, a $\psi(x)$ jest funkcją digamma. Ponieważ w PdTe₂ tylko jedno pasmo (B_1) wykazuje potencjalne parowanie Isinga, użycie modelu jednopasmowego jest uzasadnione.

Równanie (15) rozwiązaliśmy numerycznie. Uzyskane wartości $B_{c2,\parallel}$ przedstawia Rysunek 10 c). W zakresie temperatur 0.2 K-0.6 K górne pola krytyczne zawierają się pomiędzy 4 - $9 B_P$ w zależności od położenia poziomu Fermiego. Otrzymane wartości pozostają w bardzo dobrej zgodzie z wynikami eksperymentalnymi. Dla sześciowarstwowego PdTe₂ $B_{c2,\parallel}$ jest rzędu 6 - $8 B_P$ dla tego samego zakresu temperatur [55]. Warto podkreślić, że wyniki otrzymane zaproponowaną przez nas metodą opierają się wyłącznie na wartościach parametrów wyznaczonych bezpośrednio z obliczeń DFT, a parametry materiałowe niezbędne do rozwiązania równania przerwy nadprzewodzącej zostały zaczerpnięte z eksperymentu [55].

Obliczenia dla pozostałych materiałów nie wykazały ich dużej atrakcyjności w kontekście nadprzewodnictwa Isinga. Dla TiSe₂ górne pola krytyczne $B_{c2,\parallel}$ są na poziomie $2B_P$ w skończonych temperaturach, czyli tylko nieznacznie powyżej limitu Pauliego. Dla NbTe₂ w każdej z rozważanych kieszeni Fermiego b^2 nie wykazywał silnej anizotropii. Otrzymane wartości parametru $P \in [0, 0.75]$ są niewystarczające aby zaobserwować duże wartości $B_{\perp}$ przy wyznaczonych wartościach Δ_{so} . Na tej podstawie uznaliśmy, że ten materiał nie jest dobrym kandydatem na nadprzewodnik Isinga.

W celu głębszego zrozumienia różnic w anizotropii b^2 występujących pomiędzy materiałami oraz sprawdzenia poprawności zaproponowanej metody przeprowadziliśmy dogłębną analizę oddziaływania SO w strukturach pasmowych używając argumentów symetrii. Na podstawie reprezentacji symetrii pasm dla badanych materiałów (wszystkie o symetrii D_{3d}) i stosując teorię



Rysunek 11: Schematyczne przedstawienie struktury pasmowej PdTe₂ z oznaczonymi nieredukowalnymi reprezentacjami symetrii. Kolorem niebieskim oznaczono pasma biorące udział w parowaniu Isinga. Rysunek z pracy H6.

grup sformułowaliśmy hamiltonian SO w punkcie Γ uwzględniający oddziaływania wewnątrz- i międzypasmowe. Pełne analityczne rozwiązania hamiltonianu udało nam się uzyskać przy uwzględnieniu oddziaływań wewnątrzpasmowych oraz z uwzględnieniem oddziaływań międzypasmowych do pasma o reprezentacji Γ^{2-} . W przypadku uwzględnienia dodatkowo sprzężenia do pasma Γ^{3-} nie udało nam się uzyskać wszystkich stanów własnych. Z tego powodu, w pracy **H6** przedstawiliśmy rozwiązanie perturbacyjne konsystentne z pełnymi hamiltonianami.

Z analizy teoretycznej przeprowadzonej dla PdTe₂ wynikają następujące wnioski odnośnie b^2 :

- wewnątrzpasmowe oddziaływanie SO pomiędzy zdegenerowanymi pasmami B1 i B3 PdTe₂ (Rysunek 11) prowadzi jedynie do otwarcia przerwy spin-orbitalnej Δ_{so} . Stany spinowe pozostają czystymi spinorami $\uparrow/\downarrow$.
- Mieszanie spinu jest efektem uwzględnienia oddziaływań międzypasmowych. W paśmie B_1 (Γ^{3-}) mieszanie spinu wynika z oddziaływania z pasmem Γ^{3-} leżącym ok 6 eV powyżej pasma B_1 . Tłumaczy to bardzo małą amplitudę parametru b^2 . Pasma B_3 sprzęga się z pasmem Γ_2^- leżącym ok 0.7 eV poniżej, z czego wynika znacznie większa wartość b^2 niż w paśmie B_1 .

Dokonałiśmy także ciekawej obserwacji. Zgodnie z przyjętą interpretacją mechanizmu parowania Isinga z udziałem orbitali zdegenerowanych, spodziewać się można, iż oba rozszczepione dublety (pasma B_1 i B_3) powinny wykazywać silną polaryzację spinową w kierunku prostopadłym do płaszczyzny [53]. Nasze wyniki numeryczne poparte analizą symetrii wskazują jednak, że taki obraz jest uproszczony i nie uwzględnia różnic w oddziaływaniu SO w pasmach tworzących

dublet z innymi pasmami.

Analogiczną analizę przeprowadziliśmy dla NbTe₂ oraz TiSe₂. Na jej podstawie wyjaśniliśmy pochodzenie silnego mieszania spinu w pasmach TiSe₂ i NbTe₂.

4.3 Efekty bliskości spin-orbita w hybrydowych heterostrukturach van der Waalsa

W swojej czystej formie materiały rzadko posiadają własności pozwalające na ich szerokie zastosowanie. W celu uzupełnienia brakujących cech poddaje się je tzw. funkcjonalizacji, czyli procesowi kontrolowanej modyfikacji pozwalającej na uzyskanie oczekiwanych efektów. Typowym procesem funkcjonalizacji jest domieszkowanie półprzewodników pozwalające na sterowanie przerwą energetyczną.

Specyficzne własności materiałów niskowymiarowych doprowadziły do powstania nowych paradygmatów funkcjonalizacji. W odróżnieniu od próbek objętościowych, w których efekty powierzchniowe są zwykle zaniedbywalne (z pewnymi wyjątkami, jak np. powierzchniowe stany topologiczne [56]), materiały 2D są praktycznie powierzchniami. Powoduje to ogromną wrażliwość ich własności elektronowych na obecność defektów, adsorbantów, zmiany struktury atomowej wywołane np. naprężeniami [57, 58, 59], a także na bliskość innych materiałów - tzw. *efekt bliskości*.

Efekt bliskości pozwala na pozyskanie przez materiał gospodarza cech innego materiału (modyfikatora), który znajduje się w jego bliskości, przy jednoczesnym zachowaniu swoich unikalnych cech. Na przykład, grafen jest materiałem o zaniedbywalnie małym sprzężeniu SO rzędu 10 μ eV [41, 60]. Jednak w bliskości WSe₂, sprzężenie SO w pasmach Diraca indukowane bliskością WSe₂ osiąga 10 meV, co jest zmianą o cztery rzędy wielkości [61]. W analogiczny sposób można *wzbogacić* grafen o własności magnetyczne [62] lub nadprzewodnictwo [63].

Efekt bliskości można rozpatrywać jako złożenie dwóch efektów: hybrydyzacji stanów dwóch materiałów oraz modyfikacji pola krystalicznego materiału gospodarza. Pierwszy musi być dostatecznie słaby aby zachować charakterystyczne cechy materiału gospodarza, np. stożek Diraca w grafenie. Drugi, zależny także od siły hybrydyzacji, zwykle prowadzi do łamania symetrii materiału gospodarza (własności materiału modyfikującego zwykle nie są dla nas istotne), wskutek czego indukowane mogą być nowe oddziaływania, jak np. oddziaływanie spin-orbita typu Rashby przy złamaniu symetrii inwersji struktury [64].

W pracach **H7** i **H8** badaliśmy efekty bliskości spin-orbita w nanorurkach węglowych. Motywację do podjęcia badań w tym kierunku stanowiły dwa główne pytania: i) jaka jest rola geometrii materiału w kształtowaniu efektu bliskości spin-orbita; ii) jak duża jest efektywność efektu bliskości w nanorurkach, w których wewnętrzne sprzężenie spin-orbita jest o dwa rzędy

wyższe niż w grafenie. Dodatkową motywację stanowił fakt, że efekty bliskości spin-orbita w hybrydowych heterostrukturach Van der Waalsa 1D/2D były praktycznie niezbadane. Literatura zawierała jedynie kilka pozycji dotyczących nadprzewodnictwa [65], transferu ładunku pomiędzy nanorurką a powierzchniami metali [66, 67, 68] lub właściwości optycznych [69]. Nanorurki węglowe w pobliżu nadprzewodnika były również badane w kontekście stanów topologicznych [70, 71, 72, 73], jednak obecność substratu była uwzględniona tylko efektywnie, a nie w oparciu o obliczenia z zasad pierwszych.

Nanorurki węglowe są zwiniętymi płaszczyznami grafenu. Są więc idealnymi kandydatami do badania wpływu geometrii na indukowane efekty bliskości ze względu na łatwość porównania z grafenem. Zbudowane z tych samych atomów co grafen, nanorurki przejawiają jednak znacznie bogatsze spektrum własności elektronowych zależnych od średnicy i chiralności [74]. Kluczowy jest zatem odpowiedni dobór rodzaju rurki, której własności elektronowe będą najbardziej zbliżone własnościom grafenu. Najbliższe grafenowi są nanorurki typu fotel (ang. armchair). Są to struktury centrosymetryczne charakteryzujące się lokalizacją stożków Diraca w punktach K grafenu (zaniedbując drobne odchylenia spowodowane krzywizną) oraz degeneracją pasm spinowych [75]. Ponadto, w nanorurkach typu fotel dolinowo zależny hamiltonian SO Zeemana $H_Z = \tau \lambda_z \cos(3\theta) S_z$ jest równy zero, ponieważ $\theta = \pi/6$ [75].

Nanorurka (4,4) na bizmutenie

W pracy **H8** badaliśmy efekt bliskości spin-orbita w nanorurce węglowej (4,4) położonej na substracie z jednowarstwowego bizmutu (bizmutenu). Bizmuten jest półprzewodnikiem, który charakteryzuje się silnym sprzężeniem SO [76]. Obecność naturalnej przerwy pasmowej sugeruje, że stany elektronowe nanorurki w pobliżu stożków Diraca pozostaną w dużej mierze zachowane.

Obliczenia numeryczne z zasad pierwszych przeprowadzono dla dwóch konfiguracji heterostruktury nanorurka/bizmuten (CNT/Bi) różniących się położeniem rurki względem substratu (Rys. 12 a),b)). W konfiguracji A oś nanorurki znajduje się nad wiązaniem Bi-Bi w kierunku z , pomiędzy dwoma sześciokątami. Konfigurację B uzyskuje się z konfiguracji A poprzez przesunięcie nanorurki w kierunku y o połowę stałej sieci bizmutenu tak, aby najniższy łańcuch zygzag rurki znajdował się w połowie wiązań atomów bizmutu. Uzasadnienie zbadania dwóch położen nanorurki względem substratu wynikało ze znacznej różnicy długości wiązań w bizmutenie i w nanorurce. Założyliśmy, że w przypadku nanorurki (4,4) o małej średnicy i dużej krzywiznie, szczegóły jej lokalnego otoczenia (interfesju) mogą mieć znaczny wpływ na własności elektronowe.

Różnice pomiędzy konfiguracjami uwidoczniły się już na poziomie własności orbitalnych. W obu przypadkach stany nanorurki słabo hybrydują ze stanami bizmutenu w okolicach stożka Diraca, dzięki czemu jest on dobrze zachowany. Obecność substratu modyfikuje potencjał kryształiczny rurki i otwiera przerwę orbitalną Δ_{orb} w stożku Diraca. Wartość przerwy jest niemal sześciokrotnie większa dla konfiguracji B niż A: odpowiednio 3.4 meV i 0.6 meV, co wskazuje na

przewidywaną przez nas isotność lokalnych własności potencjału krystalicznego na interfejsie. Jakościowo różnice te powiązaliśmy z kształtem gęstości ładunku na interfejsie pomiędzy rurką a substratem $\rho(\mathbf{r})_{\text{int}}$ (Rysunek 12 a),b)),

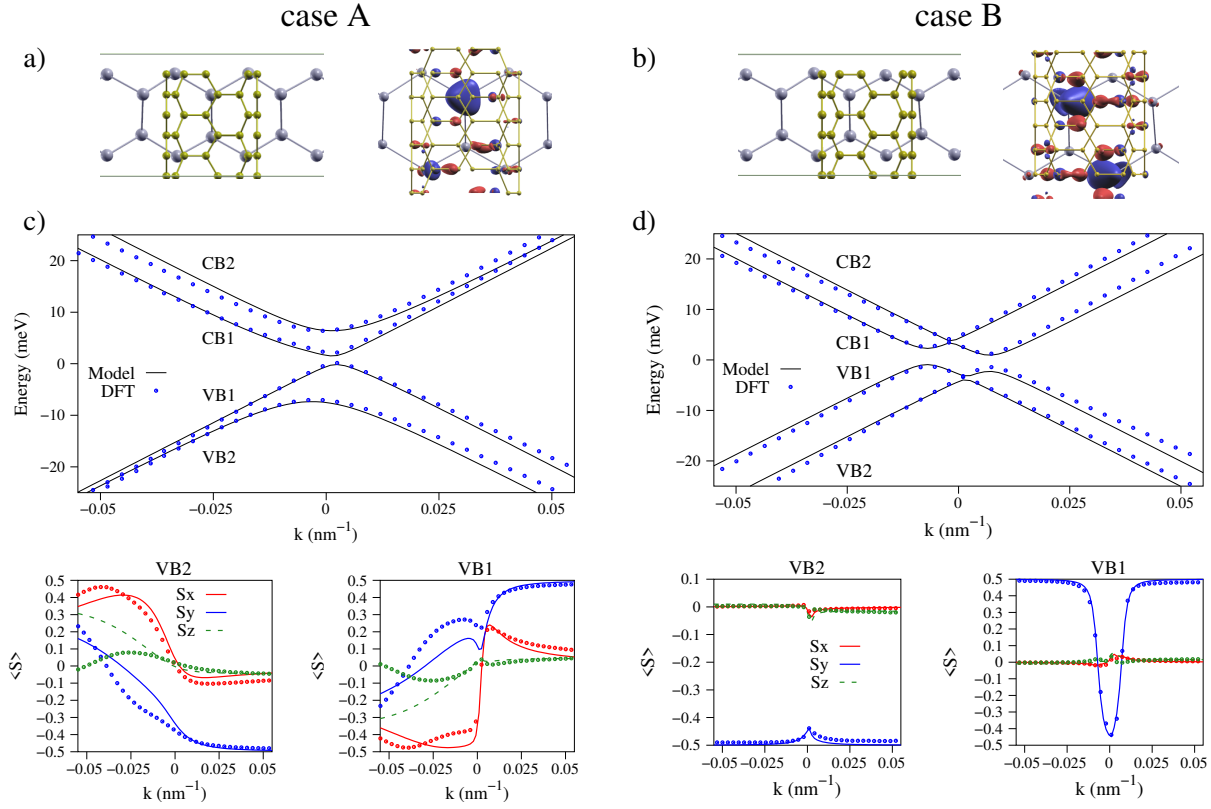
$$\rho(\mathbf{r})_{\text{int}} = \rho(\mathbf{r}) - \rho(\mathbf{r})_{\text{Bi}} - \rho(\mathbf{r})_{\text{cnt}}, \quad (16)$$

gdzie wyrazy po prawej stronie równania są gęstościami ładunku odpowiednio: dla całej hetero-struktury, samego substratu i samej nanorurki.

Uwzględnienie w obliczeniach efektów relatywistycznych skutkuje silnym efektem bliskości w nanorurce. Wskutek złamania symetrii inwersji rurki przez substrat degeneracja stanów spinowych zostaje usunięta. Otrzymane w obliczeniach energie rozszczepienia pasm Diraca w pobliżu przerwy energetycznej są rzędu meV (4 meV - 7 meV) w zależności od pasma (Rysunek 12 c),d)). Są to wartości pozwalające na dostęp do indywidualnych stanów spinowych eksperymentalnie. Należy w tym miejscu podkreślić istotność tego wyniku. Rozszczepienia rzędu meV w nanorurkach typu fotel nie są możliwe do osiągnięcia poprzez przyłożenie zewnętrznego pola elektrycznego (lub magnetycznego), jak sugerowano w pracach [77, 71]. Nasze obliczenia DFT wykazały, że dla rurki (4,4) energia rozszczepienia pochodzącego od poprzecznego pola elektrycznego jest rzędu $\Delta_E = 10 \mu\text{eV}$ per 1V/nm, na tym samym poziomie co w grafenie [42]. Wynika to z faktu, iż tylko pole prostopadłe do lokalnej powierzchni nanorurki ma wkład do rozszczepienia, podczas gdy wkład od pola lokalnie równoległego do powierzchni nanorurki znika [77]. Zaobserwowane rozszczepienia są więc manifestacją silnego efektu bliskości bizmutenu.

Drugim zaobserwowanym efektem jest nietypowa asymetria struktury pasmowej stożka Diraca i związana z nią polaryzacja spinowa pasm. W przypadku A, pasma odpowiadające modom propagującym się w prawo, tzw. *right movers*, mają znacznie mniejszą wartość rozszczepienia niż mody propagujące się w lewo, tzw. *left movers*. Ponadto, charakteryzują się one zupełnie innym kierunkiem polaryzacji spinowej, co ma istotny wpływ na rozpraszanie spinu. Koncentrując się jedynie na paśmie VB2 (Rysunek 12 c)) oraz mechanizmie Dyakonova-Perela, w którym wkład do dekoherencji składowej S_i spinu pochodzi od składowych pól spin-orbitalnych prostopadłych do kierunku S_i widać, że dla $k > 0$ komponent spinu S_y nie powinien być silnie rozpraszany ze względu na praktycznie zerową amplitudę S_x i S_z . Dla $k < 0$ wszystkie składowe spinu są niezerowe, co sugeruje brak wyróżnionego kierunku polaryzacji spinowej.

Zarówno struktura pasmowa, jak i charakter polaryzacji pasmowej nanorurki ulega istotnym zmianom po przesunięciu rurki do pozycji B (Rysunek 12 d)). W tym przypadku pasma charakteryzują się mniejszą asymetrią rozszczepienia spinowego niż dla przypadku A. Rozszczepienie ma jednak inny charakter niż dla przypadku A. Zamiast pionowego rozsunęcia podpasz spinowych obserwujemy ich poziome rozsuniecie w pędzie krystalicznym k , w przeciwnym kierunku dla każdego pasma. Skutkuje to powstaniem dwóch stożków Diraca o podobnych energiach, ale o przeciwnych kierunkach spinu. Co istotne, w tym przypadku jedynie komponent spinu S_y



Rysunek 12: Efekt bliskości SO w nanorurce (4,4) na bizmutenie. a) Widok struktury krystalicznej z góry wraz z gęstością ładunku na interfejsie ρ_{int} wyznaczoną z Równania (16), b) To samo co na a) ale dla nanorurki przesuniętej w prawo o połowę stałej sieci bizmutenu. c) Struktura elektronowa heterostruktury w otoczeniu stożka Diraca nanorurki wraz z teksturą spinową pasm. Punkty reprezentują dane z obliczeń DFT, linie ciągłe dane zrekonstruowane przy użyciu efektywnego hamiltonianu (17). d) To samo co na c) ale dla konfiguracji B.

jest niezerowy, co prowadzi do powstania trwałej tekstury spinowej pasm. W takim przypadku mechanizm relaksacji Dyakonova-Perela jest silnie tłumiony [78, 79], a nanorurka staje się doskonałym kanałem transportu spinu.

W celu otrzymania intuicyjnego obrazu oddziaływań odpowiedzialnych za powstanie zaobserwowanych efektów sformułowaliśmy efektywny hamiltonian, którego parametry zostały dopasowane tak, aby odpowiednio wiernie odzwierciedlać wyniki DFT. Obecność substratu usuwa wszystkie symetrie nanorurki, wobec czego więzy na możliwe wyrazy efektywnego hamiltonianu narzucone przez symetrię zostają usunięte i każdy z wyrazów iloczynu $(\mathbf{p} \times \nabla V(\mathbf{r})) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ jest dozwolony. Przyjęliśmy jednak zasadę minimalnej ilości wyrazów, które pozwalają na dobre dopasowanie modelu do danych. W doborze modelu wykorzystaliśmy podobieństwo ubliczonych

struktur pasmowych ze strukturami nanorurki typu fotel w obecności zewnętrznych pól magnetycznego i elektrycznego [77]. Uzyskany modelowy hamiltonian w pobliżu K-punktu nanorurki ma postać

$$H = H^{orb} + H^{int} + H^R + H^{so}, \quad (17)$$

gdzie

$$H^{orb} = \tau \hbar v_F k \sigma_2 + \Delta_{st} \sigma_3 \quad (18)$$

opisuje efekty orbitalne. Pierwszy wyraz opisuje pasma Diraca z liniową dyspersją. Drugi wyraz odzwierciedla złamaną symetrię pseudospinu (podsieci) nanorurki powodowaną obecnością substratu.

Wyraz H_{int}^{so} opisuje wewnętrzne oddziaływanie SO w rurce

$$H_{int}^{so} = \alpha S_z \sigma_1, \quad (19)$$

które w przypadku izolowanej rurki zawiera już wkład od krzywizny. Wyraz

$$H^R = \tau E_x S_y \sigma_2, \quad (20)$$

reprezentuje oddziaływanie SO typu Rashby, którego źródłem jest komponent gradientu pola krystalicznego w kierunku prostopadłym do płaszczyzny bizmutenu i do osi nanorurki (x). Ostatni wyraz, H^{so} , zawiera szereg efektywnych pól spin-orbitalnych zachowujących symetrię odwrócenia w czasie

$$H^{so} = \tau \Omega_1 S_y \sigma_0 + \tau \Omega_2 S_y \sigma_3 + \Omega_3 S_y \sigma_1 + \tau \Omega_4 S_z \sigma_2, \quad (21)$$

, których źródłem (wg naszej interpretacji) jest potencjał krystaliczny na interfejsie heterostruktury.

Pierwsze dwa wyrazy z równania (21) odgrywają dominującą rolę w rekonstrukcji widma energetycznego i głównych cech tekstury spinowej. Pierwszy z nich można interpretować jako niezależny od pseudospinu (podsieciowo parzysty) hamiltonian efektywnego pola magnetycznego w kierunku y prostopadłego do pola elektrycznego E_x i do osi nanorurki (z). Oprócz modyfikacji energii stanów spinowych rozszczepionych przez pole elektryczne E_x , wyraz ten wprowadza zależne od spinu przesunięcie w k , które prowadzi do asymetrii rozszczepienia spinowego dla modów propagujących się w lewo i w prawo (jeśli $E_x \neq 0$).

Drugi wyraz w (21) opisuje podsieciowo nieparzyste efektywne pole magnetyczne o przeciwnym znaku na podsieciach A i B. Jest on analogiczny do dolinowo-zależnego oddziaływania SOC w grafenie ze złamaną symetrią pseudospinową [14, 80] i pochodzi z zależnego od podsieci hamiltonianu SOC Kane-Mele [81]. Pozostałe dwa wyrazy w równaniu (21) są niezbędne do poprawnej rekonstrukcji wartości oczekiwanych spinu. Obejmują one mieszanie podsieci za

pomocą operatorów σ_1 i σ_2 , w przeciwieństwie do Ω_1 i Ω_2 , które działają na daną podsić.

Zaproponowany model doskonale odzwierciedla wyniki DFT, co przedstawia Rysunek 12. Zarówno pasma energetyczne, jak i stosunkowo skomplikowana tekstura spinowa są dobrze zrekonstruowane przez model, co potwierdza jego poprawną formę.

Nanorurka (4,4) na platynie

Platyna jest materiałem szeroko stosowanym do wytwarzania kontaktów elektrycznych w eksperymentach transportowych [82, 83, 84]. Badania adsorpcji nanorurek na platynie wskazują, że cylindryczny kształt rurki ma istotny wpływ na transfer ładunku w tym układzie [68]. Jednak wpływ obecności platyny na strukturę pasmową i własności spinowe nie był do tej pory zbadany.

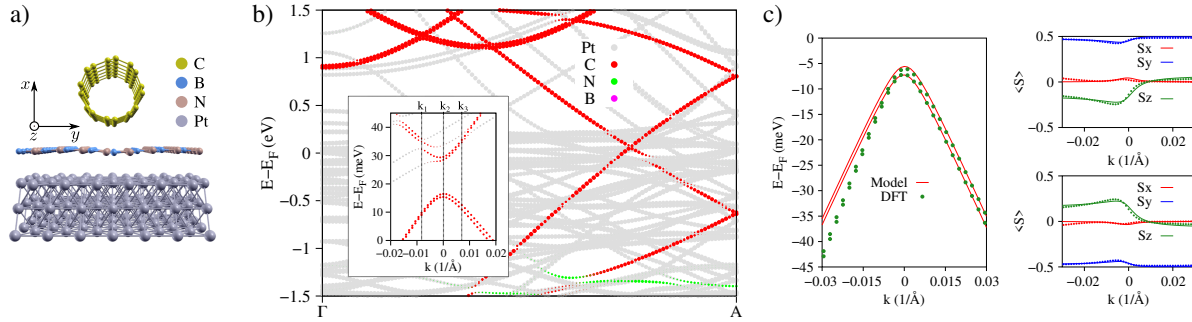
W przypadku grafenu bliskość platyny nie powoduje zniszczenia stożka Diraca grafenu, mimo istotnego transferu ładunku pomiędzy grafenem a platyną [85, 86]. Cylindryczna geometria nanorurek, w szczególności rurek o małej średnicy, prowadzi jednak do wzmocnienia oddziaływania z substratem wynikającym z tłumienia amplitud orbitali π wewnątrz rurki i ich wzmocnienia na zewnątrz rurki [68, 87]. Zadaliśmy sobie pytanie o wpływ, jaki to wzmocnione oddziaływanie ma na pasma Diraca oraz stany spinowe w rurce. Chcieliśmy także sprawdzić, czy heterostrukтуры nanorurka/bizmuten i nanorurka/platyna będą przejawiały pewne wspólne cechy charakteryzujące hybrydowe heterostrukтуры 1D/2D.

Temat podjęliśmy w pracy **H8**, która stanowi kontynuację badań nad efektem bliskości w nanorurce typu fotel. Badaliśmy efekty bliskości spin-orbita w nanorurce (4,4) umieszczonej na powierzchni (111) platyny. Podobnie jak w pracy **H7**, głównym narzędziem badawczym były obliczenia DFT.

Optymalizacja struktury krystalicznej układu pokazała, że oddziaływanie nanorurki o małej średnicy znacznie różni się od dwuwymiarowego grafenu. Oddziaływanie z platyną jest na tyle silne, że rurka zostaje przyciągana przez substrat na odległość 2.1 Å, ulegając przy tym silnej deformacji (zwięźeniu). Stany elektronowe rurki i substratu ulegają silnej hybrydyzacji, czego efektem jest całkowite rozmycie stanów stożka Diraca w rurce przez dużą gęstość stanów platyny. Jest zatem oczywiste, że w takim przypadku nie można mówić o efekcie bliskości, lecz o układzie silnie oddziałującym.

W celu ograniczenia stopnia hybrydyzacji stanów rurki i substratu, wprowadziliśmy pomiędzy rurkę a platynę pojedynczą warstwę heksagonalnego azotku boru (hBN). hBN charakteryzuje się szeroką przerwą pasmową, rzędu 6 eV oraz dużą stabilnością strukturalną, dzięki czemu jest łatwo transferowalny standardowymi metodami [88, 89].

Już na etapie optymalizacji struktury krystalicznej zauważyliśmy, że obecność warstwy hBN znacznie ogranicza oddziaływanie rurka-substrat. Cylindryczny kształt rurki pozostaje praktycznie nienaruszony (Rysunek 13 a)), a odległości pomiędzy komponentami heterostrukтуры są rzędu 3 Å, co jest wartością typową dla materiałów Van der Waalsa [90, 86, 66]. Stany elektronowe rurki w pobliżu poziomu Fermiego są dobrze zachowane, pomimo widocznej hybrydyzacji



Rysunek 13: Strukturalne i elektornowe własności heterostruktury CNT(4,4)/hBN/Pt(111). a) Zoptymalizowana struktura krystaliczna heterostruktury; b) obliczona struktura pasmowa z wyróżnieniem charakteru atomowego pasm oraz zbliżeniem na stożek Diraca nanorurki. c) Stożek Diraca pasma walencyjnego rurki wraz z teksturą spinową pasm. Punkty prezentują dane z obliczeń DFT, linie efektywny hamiltonian. Rysunek zaadaptowany z pracy H8.

ze stanami platyny (Rysunek 13 b)). Wskazuje to na przejście od reżimu silnej hybrydyzacji stanów do reżimu *efektu bliskości*.

Podobnie jak dla heterostruktury CNT/Bi, także w tym przypadku widoczna jest asymetria rozszczepienia stanów spinowych. Dla *right movers*, $\Delta_{so} \approx 0.73$ meV, podczas gdy dla *left movers* $\Delta_{so} \approx 1.7$ meV. Wartości Δ_{so} są około trzykrotnie mniejsze niż te dla nanorurki (4,4) na bizmutenie. Redukcję rozszczepienia spinowego przypisaliśmy słabszemu oddziaływaniu SO w platynie ($Z=78$) w porównaniu do bizmutu ($Z=83$) oraz efektywnemu *ekranowaniu* oddziaływania rurki z substratem przez obecność hBN.

Asymetrii struktury pasmowej towarzyszy także anizotropia tekstury spinowej (Rysunek 13 c)). Stany Blocha wykazują prawie idealną trwałą teksturę spinową z głównym kierunkiem polaryzacji S_y . Kierunek polaryzacji spinowej pasm wskazuje na dominujący efekt oddziaływania Rashby, $\tau\alpha_R S_y \sigma_2$, i efektywnego pola magnetycznego w kierunku y , $\tau\Omega_1 S_y \sigma_0$. Potwierdzają to wartości parametrów efektywnego hamiltonianu (17).

Zgodność modelu z wynikami numerycznymi (Rysunek 13 c)) jest bardzo dobra. Małe odchylenia od wyników numerycznych widoczne są na poziomie orbitalnym, co wynika z zastosowania izotropowej prędkości Fermiego dla wszystkich 4 pasm uwzględnionych w modelu. Rozbieżność ta nie wpływa jednak na dokładność opisu efektów spinowych. Warto podkreślić, że w pracy H8 zastosowaliśmy dokładnie ten sam hamiltonian (17) co w pracy H7, przy czym liczba wyrazów H^{so} jest w tym przypadku mniejsza o jeden. Wskazuje to na dobry dobór i uniwersalność zaproponowanego modelu w opisie efektów spin-orbitalnych w nanorurce typu fotel.

Wyniki zawarte w pracach H7 i H8 pozwoliły nam na sformułowanie ogólnych wniosków odnośnie efektu bliskości spin-orbita w nanorkach typu fotel.

- (i) Pokazaliśmy, że efektywne oddziaływanie SO w niskoenergetycznych pasmach nanorurki indukowane bliskością materiału o silnym oddziaływaniu SO prowadzi do pojawienia się trwałej tekstury spinowej wyróżniającej jeden kierunek spinu.
- (ii) Energia indukowanego oddziaływania oraz związane z nią rozszczepienie pasm spinowych są na poziomie pojedynczych meV, co jest wystarczającą rozdzielczością energetyczną do eksperymentalnej implementacji badanych efektów. Nasze obliczenia wskazują ponadto, że rozszczepienia stanów spinowych stożka Diraca nanorurki rzędu meV nie są możliwe do uzyskania przez przyłożenie zewnętrznego pola elektrycznego, co sugerowano w pracach [77, 71]. Podkreśla to istotność zaproponowanych rozwiązań w kontekście testowania i zastosowania nanorurek w urządzeniach do kwantowego przetwarzania informacji opartych na spinowych stopniach swobody.
- (iii) Topologia pasm Diraca oraz tekstury spinowej mogą być modyfikowane poprzez zmianę pozycji nanorurki na substracie. Zaobserwowane zmiany topologii pasm na skutek przesunięcia rurki względem substratu są analogiczne do topologii pasm grafenu na dichalkogenkach metali przejściowych, gdzie parametrem kontrolującym zmiany topologii jest względny kąt skręcenia grafenu względem substratu [91]. Uzyskany efekt *twistroniki bez twistu* pokazuje silną czułość własności elektronowych nanorurki na zmiany potencjału krystalicznego na interfejsie heterostruktury oraz na istotny wpływ geometrii układu na efekty bliskości.
- (iv) Zaproponowany efektywny hamiltonian nanorurki typu fotel wskazuje na analogię pomiędzy efektywnymi polami spin-orbitalnymi indukowanymi efektem bliskości a zewnętrznymi polami magnetycznym i elektrycznym.

4.4 Podsumowanie

Przedstawione osiągnięcie naukowe dowodzi istotnego wkładu habilitanta w rozwój współczesnego rozumienia sprzężenia spin-orbita w materiałach van der Waalsa oraz w hybrydowych układach niskowymiarowych. Pierwsza część pracy, obejmująca publikacje **H1–H5**, ustanawia rygorystyczne i eksperymentalnie zweryfikowane ramy opisu wewnętrznych oddziaływań spin-orbita oraz mechanizmów relaksacji spinu w materiałach dwuwymiarowych. Wysokoprecyzyjne obliczenia DFT czasów relaksacji spinu w czarnym fosforze (**H1–H3**) dostarczyły ilościowych przewidywań, które zostały następnie potwierdzone eksperymentalnie, co podkreśla wiarygodność zastosowanego podejścia obliczeniowego. Szeroka analiza parametru mieszania spinu w rozległej klasie materiałów 2D (**H5**) umożliwiła sformułowanie ogólnych zasad skalowania sprzężenia spin-orbita w jednoelementowych materiałach 2D.

Kluczowym osiągnięciem koncepcyjnym wynikającym z tego dorobku jest reinterpretacja parametru mieszania spinu b^2 jako fizycznie istotnego deskryptora efektywności parowania Isingowskiego, a nie jedynie pomocniczej wielkości w teorii relaksacji spinu. Spostrzeżenie to do-

prowadziło do opracowania efektywnych ram teoretycznych wiążących parametr b^2 z siłą parowania Isinga, dostarczając narzędzia predykcyjnego do identyfikacji i projektowania materiałów zdolnych do podtrzymywania odpornego nadprzewodnictwa w polach magnetycznych przekraczających limit Pauliego. Opublikowana niedawno praca przeglądowa **A2** syntetyzuje te wyniki, umieszczając je w szerszym kontekście współczesnych badań nad materiałami 2D.

Druga część osiągnięcia, reprezentowana przez publikacje **H7** i **H8**, rozszerza analizę oddziaływań spin-orbita na obszar hybrydowych heterostruktur 1D/2D, koncentrując się na nanorurkach węglowych sprzężonych z materiałami o silnym SOC. Prace te pokazują, że efekt bliskości będący jednym z kluczowych paradygmatów funkcjonalizacji materiałów 2D może być z równą skutecznością wykorzystany w układach o obniżonej wymiarowości. Traktując nanorurkę jako jednowymiarowy kanał transportowy sprzężony z podłożem 2D, badania ujawniają, w jaki sposób czynniki geometryczne unikatowe dla architektur 1D/2D modyfikują pola spin-orbitalne na interfejsie heterostruktury. Co istotne, obserwowane modyfikacje topologii pasm Diraca i tekstury spinowej naśladują zjawiska znane z twistroniki, mimo braku kąta skręcenia między komponentami heterostruktury. To swoista „twistronika bez skręcenia” ukazuje geometrię jako równie ważny parametr sterujący w inżynierii właściwości elektronowych i spinowych w układach hybrydowych.

Centralnym rezultatem tych badań jest sformułowanie efektywnego hamiltonianu pasm Diraca dla nanorurek typu fotel, umożliwiającego intuicyjną interpretację indukowanych przez efekt bliskości pól spin-orbita poprzez analogię do zewnętrznych pól magnetycznych i elektrycznych. Model ten nie tylko wyjaśnia mechanizmy odpowiedzialne za modyfikacje struktury pasmowej, lecz także stanowi narzędzie predykcyjne do projektowania heterostruktur o kontrolowanych właściwościach spinowych. Tym samym tworzy podstawy do inżynierii sprzężenia spin-orbita w nanorurkach węglowych - kluczowego kroku na drodze do przyszłych urządzeń spintronicznych opartych na architekturach 1D/2D.

4.5 Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo-badawczych

Poza badaniami stanowiącymi podstawę niniejszego wniosku habilitacyjnego zainteresowania naukowe habilitanta obejmują także inne obszary szeroko pojętej fizyki układów niskowymiarowych.

SPINTRONIKA

Badania materiałów 2D w kontekście ich własności spintronicznych stanowią główny nurt badań habilitanta (**A1-A12**). Obejmują one charakterystykę i metody funkcjonalizacji oddziaływania SO w fosforenie i innych materiałach 2D oraz metody inżynierii oddziaływania SO poprzez czynniki zewnętrzne takie jak ciśnienie, pole elektryczne lub efekty bliskości. Podsumowaniem badań w tym kierunku jest praca przeglądowa **A2**, w której przedstawiliśmy metody opisu

oddziaływania SO w materiałach 2D na bazie obliczeń z zasad pierwszych.

TWISTRONIKA W MATERIAŁACH 2D

W pracy **A14** badaliśmy wpływ kąta skręcania dwuwarstwy PtSe₂ na jej własności elektronowe oraz absorpcję promieniowania. Omówiliśmy także możliwość modyfikacji własności optycznych dwuwarstwy poprzez przyłożenie zewnętrznego ciśnienia. Praca **A15** dotyczy skręconej dwuwarstwy grafenu. Pokazaliśmy, że dla kąta ok 22° stany elektronowe z dwóch warstw grafenu są elektronicznie odsprężone ze względu na dużą separację pędową. Istotną rolę w interpretacji wyników eksperymentalnych odegrały obliczenia DFT przeprowadzone przez habilitanta. Obliczenia pokazały jakościowo inny charakter dielektryczny interfejsu pomiędzy warstwami grafenu dla konfiguracji AA, AB oraz badanej skręconej dwuwarstwy, co pozwoliło na poprawną parametryzację modeli elektrostatycznych wykorzystanych do teoretycznego odtworzenia wyników eksperymentu.

DYNAMIKA I DETEKCJA PRZEJŚĆ FAZOWYCH

W pracy **A12** sprawdzaliśmy efektywność rozpoznawania temperatury oraz rodzaju przejść fazowych przez sieć neuronową w zastosowaniu do modelowych hamiltonianów ciała stałego. Jednym z ciekawszych wyników tej pracy jest wykazanie zdolności sieci neuronowej do rozpoznawania różnic w konfiguracjach defektów sieci różniących się tylko jednym defektem, wskutek czego osiąga ona efektywność bliską jedności dla szerokiego zakresu temperatur.

NOWE FORMY KRYSTALICZNE W DWUWYMIAROWYCH PUŁAPKACH POTENCJALNYCH

W ramach współpracy naukowej z naukowcami ze Słowacji i Austrii badamy nowe formy krystaliczne enkapsulowane warstwami grafenowymi. Materiały te są wytwarzane w procesie chemicznym, którego dynamika pozwala na wytworzenie specyficznych warunków pozwalających na krystalizację materiałów w nowych formach 1D i 2D. Co więcej, pułapka potencjalna (ang. confinement) wytwarzana przez warstwy grafenowe pozwala na dynamiczne śledzenie przejść fazowych, co pokazaliśmy w pracy **A2**, w której po raz pierwszy zaobserwowaliśmy fazę heksatyczną w kowalencyjnym materiale 2D.

INŻYNIERIA PRZERWY ENERGETYCZNEJ ORAZ RELAKSACJA SPINU W NANOSTRUKTURACH MEZOSKOPOWYCH

Seria prac **A16-A20** poświęcona jest inżynierii właściwości elektronowych pierścieni kwantowych oraz nanostruktur typu pierścień kwantowy–kropka kwantowa. Zbadaliśmy relaksację spinu w kropkach i pierścieniach kwantowych, koncentrując się na kluczowych podobieństwach i różnicach między tymi układami. Wykazaliśmy również, że połączenie obu geometrii w jednym układzie — nanostrukturze typu kropka-pierścień — umożliwia wysoki stopień strojenia jej właściwości transportowych i spinowych.

4.6 Lista prac opublikowanych po uzyskaniu stopnia doktora z wyłączeniem prac H1-H8 przedstawionych jako osiągnięcie naukowe.

- A1 Marko Milivojević, Juraj Mnich, Paulina Jureczko, Marcin Kurpas, and Martin Gmitra, *Ferroelectric switching control of spin current in graphene proximitized by In_2Se_3* . [Materials Futures](#), **5**, 015201 (2026). Impact Factor: 10.8
- A2 Paulina Jureczko, Zbigniew Dendzik, and Marcin Kurpas, *Optimizing optical properties of bilayer PtSe_2 : The role of twist angle and hydrostatic pressure*, [Applied Physics Letters](#), **128** (2026). Impact Factor: 3.6
- A3 Klaus Zollner, Marcin Kurpas, Martin Gmitra, and Jaroslav Fabian. First-principles determination of spin-orbit coupling parameters in two-dimensional materials. [Nature Reviews Physics](#), **7**, 255 (2025). Impact Factor: 39.5
- A4 Paulina Jureczko, Marko Milivojević, and Marcin Kurpas, *Strain-tuning of spin anisotropy in single-layer phosphorene: insights from elliott-yafet and dyakonov-perel spin relaxation*. [New Journal of Physics](#), **27**, 053006 (2025). Impact Factor: 2.8
- A5 Marko Milivojević, Marcin Kurpas, Maedeh Rassekh, Dominik Legut, and Martin Gmitra, *Hydrostatic pressure control of the spin-orbit proximity effect, spin relaxation, and thermoelectricity in a phosphorene- WSe_2 heterostructure*. [Physical Review B](#), **110**, 085306, (2024). Impact Factor: 3.7
- A6 Marko Milivojević, Martin Gmitra, Marcin Kurpas, Ivan Štich, and Jaroslav Fabian, *Giant asymmetric proximity-induced spin-orbit coupling in twisted graphene/snte heterostructure*, [2D Materials](#), **11**, 035036 (2024). Impact Factor: 4.3
- A7 Marko Milivojević, Martin Gmitra, Marcin Kurpas, Ivan Štich, and Jaroslav Fabian, *Proximity-enabled control of spin-orbit coupling in phosphorene symmetrically and asymmetrically encapsulated by WSe_2 monolayers*, [Physical Review B](#), **109**, 075305 (2024). Impact Factor: 3.7
- A8 Marko Milivojević, Martin Gmitra, Marcin Kurpas, Ivan Štich, and Jaroslav Fabian, *Proximity-induced spin-orbit coupling in phosphorene on a WSe_2 monolayer*. [Physical Review B](#), **108**, 115311 (2023). Impact Factor: 3.2
- A9 Paulo E. Faria Junior, Klaus Zollner, Tomasz Woźniak, Marcin Kurpas, Martin Gmitra, and Jaroslav Fabian, *First-principles insights into the spin-valley physics of strained transition metal dichalcogenides monolayers*. [New Journal of Physics](#), **24**, 083004 (2022). Impact Factor: 3.3

- A10 Paulina Jureczko and Marcin Kurpas, *Spin-orbit coupling in buckled monolayer nitrogene*, [Scientific Reports](#), **12**, 3201, (2022). Impact Factor: 4.6
- A11 Paulo E Faria Junior, Marcin Kurpas, Martin Gmitra, and Jaroslav Fabian, *$k \cdot p$ theory for phosphorene: Effective g -factors, landau levels, and excitons*, [Physical Review B](#), **100**, 115203, (2019). Impact Factor: 3.57
- A12 Julian Siegl, Anton Bleibaum, Wen Wan, Marcin Kurpas, John Schliemann, Miguel M Ugeda, Magdalena Marganska, and Milena Grifoni, *Friedel oscillations and chiral superconductivity in monolayer $NbSe_2$* . [Nature Communications](#), **16**, 8228 (2025). Impact Factor: 15.7
- A13 Monika Richter-Laskowska, Marcin Kurpas, and Maciej M Maška. *Learning by confusion approach to identification of discontinuous phase transitions*, [Physical Review E](#), **108**, 024113 (2023). Impact Factor: 2.4
- A14 Thuy An Bui, David Lamprecht, Jacob Madsen, Marcin Kurpas, Peter Kotrusz, Alexander Markevich, Clemens Mangler, Jani Kotakoski, Lado Filipovic, Jannik C Meyer, et al., *Hexatic phase in covalent two-dimensional silver iodide*, [Science](#), **390**, 1033 (2025). Impact Factor: 45.8
- A15 Peter Rickhaus, Ming-Hao Liu, Marcin Kurpas, Annika Kurzmann, Yongjin Lee, Hiske Overweg, Marius Eich, Riccardo Pisoni, Takashi Taniguchi, Kenji Watanabe, et al. *The electronic thickness of graphene*, [Science Advances](#), **6**, eaay8409 (2020). Impact Factor: 14.1
- A16 Marcin Kurpas, Barbara Kedzierska, Iwona Janus-Zygmunt, Anna Gorczyca-Goraj, Elżbieta Wach, Elżbieta Zipper, and Maciej M Maška. *Charge transport through a semiconductor quantum dot-ring nanostructure*, [Journal of Physics: Condensed Matter](#), **27**, 265801 (2015). Impact Factor: 2.2
- A17 Iwona Janus-Zygmunt, Barbara Kedzierska, Anna Gorczyca-Goraj, Marcin Kurpas, Maciej Maška, and Elżbieta Zipper, *Application of the dot-ring nanostructure to control electrical transport in the coulomb blockade regime*, [Acta Physica Polonica A](#), **126**, 1171 (2014). Impact Factor: 1.14
- A18 Elżbieta Zipper, Marcin Kurpas, and Maciej M Maška, *Wave function engineering in quantum dot-ring nanostructures*, [New Journal of Physics](#), **14**, 093029 (2012). Impact Factor: 4.03
- A19 Marcin Kurpas, Elżbieta Zipper, and Maciej M Maška, *Engineering of electron states and spin relaxation in quantum rings and quantum dot-ring nanostructures*, In [Physics of Quantum Rings](#), pages 455–479. Springer Berlin Heidelberg Berlin, Heidelberg (2013).

- A20 Elżbieta Zipper, Marcin Kurpas, Janusz Sadowski, and Maciej M Maśka, *Spin relaxation in semiconductor quantum rings and dots—a comparative study*, [Journal of Physics: Condensed Matter](#), **23**, 115302 (2011). Impact Factor: 2.355
- A21 E. Zipper and M. Kurpas, *Entanglement of Matter Qubits at a Distance*, J. Comput. Theor. Nanosci. **7**, 1642 (2010). Impact Factor: 1.4

Summaryczny Impact Factor (A1-A21): 175.14

4.7 Dane naukometryczne

Dane na dzień 27.05.2026

Impact Factor (wg roku ukazania się artykułów) : 236.271

	Web of Science	Google Scholar
Liczba cytowań	664	876
Liczba cytowań bez autocytowań	594	
Indeks Hirscha	12	14

5 Informacja o wykazywaniu się istotną aktywnością naukową albo artystyczną realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury, w szczególności zagranicznej.

5.1 Współpraca naukowa

Habibant aktywnie współpracuje z naukowcami z renomowanych krajowych i zagranicznych ośrodków badawczych. Wysoka efektywność tej współpracy znajduje potwierdzenie we wspólnych publikacjach oraz realizowanych projektach naukowych. Aktualne kontakty i przedsięwzięcia badawcze obejmują współpracę z następującymi naukowcami:

- Jaroslav Fabian (Universitat Regensburg)
- Martin Gmitra (Pavol Jozef Šafárik University in Košice)
- Kimmo Mustonen (Universitat Wien)

- Viera Skakalova (Institute of Electrical Engineering of Slovak Academy of Sciences)
- Marko Milivojević (Institute of Informatics, Slovak Academy of Sciences)
- Magdalena Margańska-Łyżniak (Universitat Regensburg/Politechnika Wrocławska)
- Maciej Maśka (Politechnika Wrocławska)

5.2 Granty

W ramach współpracy międzynarodowej habilitant kierował dwoma projektami badawczymi:

- **Band-Gap Engineering in Unconventional Semiconductors** (2022-2025) w ramach międzynarodowego programu "V4-Japonia", Narodowe Centrum Badań i Rozwoju (NCBR). Badania prowadzone były z czterema partnerami z Grupy Wyszehradzkiej oraz partnerem japońskim.
- **Zjawiska spinowe w nanodrutach i dwuwymiarowych materiałach van der Waals** (2022-2023) w ramach programu "Wspólne projekty badawcze Polska-Słowacja", Narodowa Agencja Wymiany Akademickiej (NAWA). Partner po stronie słowackiej: Dr Martin Gmitra.

Ponadto, podczas dwuletniego stażu naukowego w latach 2015-2017 w Uniwersytecie w Regensburgu był wykonawcą w grantie **SPP 1538: Spin Caloric Transport (SpinCaT)**, Deutsche Forschungsgemeinschaft.

Prowadziłem także badania jako wykonawca w krajowych grantach i sieciach naukowych:

- **"Dynamika i termodynamika skorelowanych układów z mieszanymi kwantowo-klasycznymi stopniami swobody - nowe metody obliczeniowe"**, (2018-2020) UMO-2018/29/B/ST3/01892
- **"Korelacje i koherencja w układach makro i nano"** (2013-2015), 2013/11/B/ST3/00824
- **Scientific Network LFPPI** (2008-2009), Nr 106/E-345/BWSN-0166/2008
- **Entanglement of nano- and mesosystems** (2008-2009), Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego (N 202 131 32/3786)

5.3 Staże i wizyty naukowe

- Trzymiesięczny pobyt naukowy w ramach programu Mobilność Kadry finansowanego przez Uniwersytet Śląski, Uniwersytet w Regensburgu (15.11.2018 - 16.03.2019)

- Staż podoktorski (2 lata), Uniwersytet w Regensburgu 2015-2017
- Wizyta naukowa (guest researcher), Uniwersytet w Regensburgu 1.10.2014-31.1.2015
- Staż dydaktyczno-badawczy 2.01.2014 - 20.02.2014 (Uniwersytet w Regensburgu) finansowany z projektu NITKA zad 9. Staże i szkolenia w wiodących zagranicznych i krajowych ośrodkach akademickich i naukowo-badawczych (1 miesiąc, 2014)
- Miesięczny staż/stypendium DAAD na realizację projektu „Transport properties of a dot-ring nanostructure”, Uniwersytet w Regensburgu (07.2013 - 08.2013)
- pracownik naukowy (researcher), Nordic Hysitron Laboratory, Department of Material Science and Engineering, Aalto University, Espoo, Finland (7.2009-1.2010)
- Wizyta naukowa (2 tygodnie), Faculty of Physics, Weizmann Institute of Science, Israel, (hosts: Dr. Hadas Shtrickman, Prof. Moty Heiblum)(2007).

Poza dłuższymi wyjazdami naukowymi regularnie odbywam krótkie (do 1 tygodnia) wyjazdy do ośrodków partnerskich, a także gości naukowców zagranicznych w Instytucie Fizyki UŚ.

5.4 Wybrane prezentacje na konferencjach naukowych, sympozjach i seminariach

Habilitant aktywnie uczestniczy w konferencjach oraz seminariach naukowych prezentując i dyskutując wyniki swoich badań. Poniżej znajduje się kilka wybranych pozycji.

- *Spin-Orbit Proximity Effects in Hybrid 1D/2D Van der Waals Heterostructures* (**wykład zaproszony**), IEEE NAP Conference, Bratislava, Slovakia (2025).
- *Type-II Ising Pairing in Centrosymmetric Superconductors: Insights from First-Principles Calculations* (wykład), 30th International Conference Applied Physics of Condensed Matter APCOM 2025, June 25 - 27, Štrbské Pleso, Slovakia (2025).
- *Let's go quantum, czyli kwantowy komputer dla każdego* (**wykład zaproszony**), 49. Zjazd Fizyków Polskich, Katowice, Polska (2025).
- *Spin mixing parameter as an indicator of Ising type-II pairing* (wykład), 9th Polish Conference "Graphene and other 2D materials", Poznań, Poland, 8-10 September (2024).
- *Spin-orbit proximity effect in carbon nanotubes* (poster), XXXVth International Winter-school on Electronic Properties of Novel Materials, Kirchberg, 18 - 24 March, (2023)
- *Proximity spin-orbit coupling in carbon nanotubes on 2D materials* (**wykład zaproszony**) Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Slovakia (2022).

- *Monolayer and bilayer PtSe₂: spin orbit-coupling, spin relaxation and twisting* (wykład), 6th Polish Conference Graphene and other 2D materials, Wrocław, Poland (2021).
- *Spin-orbit coupling and spin mixing and in two-dimensional materials* (**wykład zaproszony**), 2D Materials: From Fundamental to Spintronics, Natal, Brasil (2019).
- *Rewolucja w dwóch wymiarach, czyli o tym, jak taśma klejąca zmieniła fizykę* (**wykład zaproszony**), Seminarium PTF, Katowice, Poland (2019).
- *Spin-orbit coupling and spin mixing in two-dimensional materials*, (**wykład zaproszony**) Katedra Fizyki Teoretycznej, Politechnika Wrocławska, Wrocław, Poland (2019)
- *Spin mixing and spin relaxation in two-dimensional materials* (wykład), 47th International School & Conference on the Physics of Semiconductors "Jaszowiec 2018", Szczyrk, Poland (2018).
- *Dynamika spinu w czarnym fosforze: w stronę urządzeń spinowych o nanosekundowych czasach relaksacji* (**wykład zaproszony**), Instytut Fizyki Uniwersytet Jagielloński, Kraków, Poland, (2017).
- *Mechanizm Elliotta-Yafeta relaksacji spinu w czarnym fosforze i innych materiałach 2D* (wykład), III Krajowa Konferencja „Grafen i inne materiały 2D”, Szczecin, 6-8 września (2017).
- *Spin-orbit coupling and spin relaxation in phosphorene* (wykład), APS March Meeting, Baltimore, USA, (2016).
- *Spin-orbit coupling and spin relaxation in phosphorene* (wykład), DPG Meeting, Regensburg, Germany (2016)
- *Charge transport through a semiconductor Dot-Ring Nanostructure* (wykład), International Conference "Correlations and Coherence at Different Scales", Ustroń, Poland (2014).
- *Entanglement swapping with artificial atoms* (**wykład zaproszony**), Quantum Technologies Conference, Toruń, Poland (2010).

6 Informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę lub sztukę

6.1 Działalność dydaktyczna i popularyzatorska

- Prowadzenie wykładów i warsztatów z mechaniki i komputerów kwantowych w szkołach średnich w ramach projektu "Informatyka kwantowa i chemia na rzecz zielonej przyszłości

Uniwersytet Śląski w Katowicach wspiera studentów i uczniów szkół ponadpodstawowych” (2025)

- Wykładowca w ramach Międzynarodowej Szkoły Letniej ”Vinci”, Uniwersytet Śląski, (2021)
- Promocja kierunku Ekonofizyka w ramach projektu ”Czas na ekonomię”. Cykl wykładów popularyzatorskich w szkołach średnich (2014)
- Przygotowanie ogólnodostępnego skryptu ”Wybrane zagadnienia ekonometrii z wykorzystaniem programu Statistica” dla studentów kierunku Ekonofizyka (2014)
- Współrealizacja projektu ”iCSE Innovative Computing in Science Education”. Przygotowanie materiałów dydaktycznych.
- Stworzenie i wieloletnia opieka nad stronami www Zakładu Fizyki Teoretycznej, Zakładu Astrofizyki i Kosmologii, projektu UPGOW, projektu Twing

6.2 Doświadczenie dydaktyczne

Habibant posiada bogate doświadczenie dydaktyczne zdobyte w kraju, jak i zagranicą (Uniwersytet w Regensburgu, Niemcy). Tematyka prowadzonych zajęć jest bardzo szeroka, od podstaw matematyki, poprzez ekonometrię, grafikę komputerową, aż po teorię ciała stałego. Szczegółowa lista prowadzonych zajęć znajduje się poniżej.

- | | |
|--|--|
| • Teoria Ciała Stałego (Wykład, konwersatorium) | • Fizyka fazy skondensowanej (wykład) |
| • Mesoscopic physics (University of Regensburg 2016) (konwersatorium) | • Zaawansowana fizyka fazy skondensowanej (wykład) |
| • Quantum Mechanics (University of Regensburg) (konwersatorium) | • Analiza matematyczna II (konwersatorium) |
| • Selected Topics of Solid State Physics (lecture) | • Programowanie (laboratorium), |
| • Mechanika kwantowa I, III (wykład, konwersatorium) | • Fizyka układów mezoskopowych (wykład, ćwiczenia, laboratorium) |
| • Elementy Mechaniki Kwantowej - kurs dla doktorantów (konwersatorium) | • Wybrane zagadnienia z fizyki kwantowej (wykład, konwersatorium) |
| • Fizyka statystyczna (konwersatorium) | • Wybrane zagadnienia z fizyki teoretycznej (wykład, konwersatorium) |
| | • Statystyka (ćwiczenia) |

- Ekonometria (wykład, konwersatorium)
- Elementy matematyki (konwersatorium)
- Zastosowanie Informatyki w medycynie (laboratorium)
- Systemy operacyjne (laboratorium),
- Współczesne zastosowania informatyki (laboratorium)
- Grafika komputerowa (laboratorium)
- Technologia informacyjna (laboratorium)
- Pracownia Dyplomowa (warsztat)

6.2.1 Opieka nad studentami

Promotor pomocniczy w przewodach doktorskich

- mgr Paulina Jureczko, tytuł rozprawy ”*Spin effects in low-dimensional materials*” (w trakcie realizacji).
- dr M. Richter-Laskowska, tytuł rozprawy ”*Application of machine learning algorithms to statistical physics and biophysics*” (2023).

Wypromowane prace dyplomowe:

- ”*Efektywne modele ciasnego wiązania dla wybranych materiałów dwuwymiarowych na podstawie obliczeń DFT*”, praca licencjacka (2025).
- ”*Modelowanie własności fizycznych układów dwuwymiarowych w oparciu o teorię funkcjonalów gęstości (DFT)*”, praca magisterska (2020).
- ”*Wpływ naprężenia na własności spinowe czarnego fosforu*”, praca magisterska (2018).
- ”*Budowa i oprogramowanie demonstracyjnego układu pomiarowego dla układu pompy ciepła*”, praca magisterska realizowana we współpracy z firmą GHS Polska ,(2016).
- ”*Losowe generowanie muzyki - podejście statystyczne*”, praca magisterska (2015).
- ”*Motyl Hofstadtera w nanostrukturach grafenowych - modelowanie komputerowe*”, praca inżynierska (2015).
- ”*Analiza i modelowanie wartości rynkowej zawodników NBA*”, praca magisterska (2014).
- ”*Analiza i modelowanie wartości rynkowej zawodników piłki nożnej*”, praca licencjacka (2013).

6.3 Działalność organizacyjna i ekspercka

- Koordynator ds. promocji kierunków studiów Fizycznych w Instytucie Fizyki, Uniwersytet Śląski, (od 2022).
- Członek Rady Dydaktycznej Kierunku Studiów Biofizyka, Fizyka, Fizyka Medyczna, Mikro i Nanotechnologia, Uniwersytet Śląski (od 2022).
- Członek Rady ds. Współpracy z Azją, Uniwersytet Śląski (od 2024).
- Członek Rady Instytutu Fizyki UŚ (od 2023).
- Członek zespołów ds. opracowania nowych specjalności oraz siatek studiów kierunku Fizyka, Fizyka Nauczycielska, Uniwersytet Śląski (2021, 2024).
- Współorganizator XX Święta Liczby Pi, Uniwersytet Śląski (2023).
- Projektowanie i wykonanie materiałów promocyjnych: plakatów, ulotek, banerów reklamowych, materiałów cyfrowych, kierunków studiów oferowanych przez WNST, UŚ (2023-2025).
- Współorganizacja międzynarodowej konferencji *Correlations and Coherence at Different Scales*, Ustroń w latach 2012, 2014, 2016, 2018 (obowiązki: organizacja sesji posterowej, logistyka, zapraszanie i opieka nad gośćmi, praca w Komitecie Doradczym).
- Członek zespołu ds. wdrażania Krajowych Ram Kwalifikacji w Instytucie Fizyki UŚ (2011/2012).
- Recenzent w czasopismach naukowych:

– Physical Review Letters	– Physics Letters A
– Physical Review B	– Computational Condensed Matter
– Chemical Physics Letters	– Physica Status Solidi B
– ACS Applied Nano Materials	– Micro and Nanostructures
– Scientific Reports	– Acta Physica Polonica A
– Advanced Theory and Simulations	– Physica B

Literatura

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306(5696):666–669, 2004.

-
- [2] N. D. Mermin. Crystalline order in two dimensions. *Phys. Rev.*, 176:250–254, Dec 1968.
 - [3] J. C. Slonczewski and P. R. Weiss. Band structure of graphite. *Phys. Rev.*, 109:272–279, Jan 1958.
 - [4] K S Novoselov, A K Geim, S V Morozov, D Jiang, M I Katsnelson, I V Grigorieva, S V Dubonos, and A A Firsov. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature*, 438(7065):197–200, 2005.
 - [5] Wei Han, Roland K Kawakami, Martin Gmitra, and Jaroslav Fabian. Graphene spintronics. *Nat. Nanotechnol.*, 9(10):794–807, 2014.
 - [6] A. Avsar, H. Ochoa, F. Guinea, B. Özyilmaz, B. J. van Wees, and I. J. Vera-Marun. Colloquium: Spintronics in graphene and other two-dimensional materials. *Rev. Mod. Phys.*, 92:021003, Jun 2020.
 - [7] Sten Hastrup, Mikkel Strange, Mohnish Pandey, et al. The computational 2d materials database: high-throughput modeling and discovery of atomically thin crystals. *2D Materials*, 5(4):042002, sep 2018.
 - [8] Daniele Torelli, Hadeel Moustafa, Karsten W. Jacobsen, and Thomas Olsen. High-throughput computational screening for two-dimensional magnetic materials based on experimental databases of three-dimensional compounds. *npj Computational Materials*, 6(1):158, October 2020.
 - [9] Xiaoxiang Xi, Liang Zhao, Zefang Wang, Helmuth Berger, László Forró, Jie Shan, and Kin Fai Mak. Strongly enhanced charge-density-wave order in monolayer NbSe₂. *Nat. Nanotechnol.*, 10(9):765–769, 2015.
 - [10] Daniel Wines, Kamal Choudhary, Adam J. Biacchi, Kevin F. Garrity, and Francesca Tavazza. High-throughput dft-based discovery of next generation two-dimensional (2d) superconductors. *Nano Letters*, 23(3):969–978, 2023. PMID: 36715314.
 - [11] Qimin Yan, Tongcang Li, Xingyu Gao, Sumukh Vaidya, Saakshi Dikshit, Yue Luo, Stefan Strauf, Reda Moukaouine, et al. Roadmap: 2d materials for quantum technologies, 2025.
 - [12] Igor Žutić, Jaroslav Fabian, and S. Das Sarma. Spintronics: Fundamentals and applications, 2004.
 - [13] Albert Fert. Nobel lecture: Origin, development, and future of spintronics. *Rev. Mod. Phys.*, 80:1517–1530, Dec 2008.

- [14] Martin Gmitra, Denis Kochan, and Jaroslav Fabian. Spin-orbit coupling in hydrogenated graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 110:246602, Jun 2013.
- [15] Denis Kochan, Martin Gmitra, and Jaroslav Fabian. Spin relaxation mechanism in graphene: Resonant scattering by magnetic impurities. *Phys. Rev. Lett.*, 112:116602, Mar 2014.
- [16] Bart Raes, Jeroen E Scheerder, et al. Determination of the spin-lifetime anisotropy in graphene using oblique spin precession. *Nat. Commun.*, 7(1):11444, 2016.
- [17] P. Boguslawski. Electron-electron spin-flip scattering and spin relaxation in iii-v and ii-vi semiconductors. *Solid State Communications*, 33(3):389–391, 1980.
- [18] G.L. Bir, A.G. Aronov, and G.E. Pikus. Spin relaxation of electrons scattered by holes. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 69(4):1382–1397, Oct 1975.
- [19] M. I. Dyakonov and V. I. Perel'. Optical orientation in a system of electrons and lattice nuclei in semiconductors. theory. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 65(1):362–376, 1973. English translation: Sov. Phys. JETP 38, 177 (1974).
- [20] R. J. Elliott. Theory of the Effect of Spin-Orbit Coupling on Magnetic Resonance in Some Semiconductors. *Phys. Rev.*, 96(2):266–279, October 1954.
- [21] Y. Yafet. in *Solid State Physics*. edited by F. Seitz and D. Turnbull (Academic Press, New York, 1963), Vol. 14.
- [22] M. I. Dyakonov and V. I. Perel. Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors. *Phys. Lett. A*, 35:459–460, July 1971.
- [23] M. I. Dyakonov and V. I. Perel. Spin relaxation of conduction electrons in noncentrosymmetric semiconductors. *Sov. Phys. Solid State*, 13:3023–3026, 1971.
- [24] H. Schmidt, I. Yudhistira, L. Chu, A. H. Castro Neto, B. Özyilmaz, S. Adam, and G. Eda. Quantum transport and observation of dyakonov-perel spin-orbit scattering in monolayer mos_2 . *Phys. Rev. Lett.*, 116:046803, Jan 2016.
- [25] J. Fabian and S. Das Sarma. Spin Relaxation of Conduction Electrons in Polyvalent Metals: Theory and a Realistic Calculation. *Phys. Rev. Lett.*, 81(25):5624–5627, December 1998.
- [26] Bernd Zimmermann, Phivos Mavropoulos, Swantje Heers, Nguyen H. Long, Stefan Blügel, and Yuriy Mokrousov. Anisotropy of spin relaxation in metals. *Phys. Rev. Lett.*, 109:236603, Dec 2012.
- [27] Hideo Asahina, Koichi Shindo, and Akira Morita. Electronic structure of black phosphorus in self-consistent pseudopotential approach. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 51(4):1193–1199, 1982.

- [28] Vy Tran, Ryan Soklaski, Yufeng Liang, and Li Yang. Layer-controlled band gap and anisotropic excitons in few-layer black phosphorus. *Phys. Rev. B*, 89:235319, Jun 2014.
- [29] Han Liu, Adam T. Neal, Zhen Zhu, Zhe Luo, Xianfan Xu, David Tománek, and Peide D. Ye. Phosphorene: An unexplored 2d semiconductor with a high hole mobility. *ACS Nano*, 8(4):4033–4041, 2014.
- [30] Fengnian Xia, Han Wang, and Yichen Jia. Rediscovering black phosphorus as an anisotropic layered material for optoelectronics and electronics. *Nat. Commun.*, 5:4458, 2014.
- [31] Gen Long, Denis Maryenko, et al. Achieving ultrahigh carrier mobility in two-dimensional hole gas of black phosphorus. *Nano Letters*, 16(12):7768–7773, 2016.
- [32] Z. S. Popović, Jamshid Moradi Kurdestany, and S. Satpathy. Electronic structure and anisotropic rashba spin-orbit coupling in monolayer black phosphorus. *Phys. Rev. B*, 92:035135, Jul 2015.
- [33] Jingsi Qiao, Xianghua Kong, Zhi-Xin Hu, Feng Yang, and Wei Ji. High-mobility transport anisotropy and linear dichroism in few-layer black phosphorus. *Nat. Commun.*, 5:4475, 2014.
- [34] Fabien Tran and Peter Blaha. Accurate band gaps of semiconductors and insulators with a semilocal exchange-correlation potential. *Phys. Rev. Lett.*, 102:226401, Jun 2009.
- [35] Pengke Li and Ian Appelbaum. Electrons and holes in phosphorene. *Phys. Rev. B*, 90:115439, Sep 2014.
- [36] E.I. Rashba. Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures. *Sov. Phys. Solid State*, 2:1109, 1960.
- [37] Yoshiaki Hattori, Takashi Taniguchi, Kenji Watanabe, and Kosuke Nagashio. Layer-by-layer dielectric breakdown of hexagonal boron nitride. *ACS Nano*, 9(1):916–921, 2015. PMID: 25549251.
- [38] Linfei Li, Shuang-zan Lu, Jinbo Pan, et al. Buckled germanene formation on pt(111). *Adv. Mater.*, 26(28):4820–4824, 2014.
- [39] Fengnian Xia, Han Wang, and Yichen Jia. Rediscovering black phosphorus as an anisotropic layered material for optoelectronics and electronics. *Nat. Commun.*, 5:4458, jul 2014.
- [40] Douglas Warschauer. Electrical and optical properties of crystalline black phosphorus. *Journal of Applied Physics*, 34(7):1853–1860, 07 1963.

-
- [41] Hongki Min, J. E. Hill, N. A. Sinitsyn, et al. Intrinsic and rashba spin-orbit interactions in graphene sheets. *Phys. Rev. B*, 74:165310, Oct 2006.
 - [42] M Gmitra, S Konschuh, C Ertler, C Ambrosch-Draxl, and J Fabian. Band-structure topologies of graphene: Spin-orbit coupling effects from first principles. *Phys. Rev. B*, 80(23):235431, 2009.
 - [43] C. L. Kane and E. J. Mele. Z_2 topological order and the quantum spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 95:146802, Sep 2005.
 - [44] Peter E. Blöchl, O. Jepsen, and O. K. Andersen. Improved tetrahedron method for brillouin-zone integrations. *Phys. Rev. B*, 49:16223–16233, Jun 1994.
 - [45] K. V. Shanavas, Z. S. Popović, and S. Satpathy. *Phys. Rev. B*, 90:165108, Oct 2014.
 - [46] Yuda Zhao, Jingsi Qiao, et al. High-electron-mobility and air-stable 2d layered ptse2 fets. *Advanced Materials*, 29(5):1604230, 2017.
 - [47] B. S. Chandrasekhar. A note on the maximum critical field of high-field superconductors. *Appl. Phys. Lett.*, 1(1):7–8, 1962.
 - [48] A. M. Clogston. Upper limit for the critical field in hard superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 9:266–267, Sep 1962.
 - [49] J. M. Lu, O. Zheliuk, I. Leermakers, N. F.Q. Yuan, U. Zeitler, K. T. Law, and J. T. Ye. Evidence for two-dimensional Ising superconductivity in gated MoS₂. *Science*, 350(6266):1353–1357, 2015.
 - [50] Xiaoxiang Xi, Zefang Wang, Weiwei Zhao, et al. Ising pairing in superconducting NbSe₂ atomic layers. *Nat. Phys.*, 12(2):139–143, 2016.
 - [51] Menghan Liao, Yunyi Zang, Zhaoyong Guan, Haiwei Li, et al. Superconductivity in few-layer stanene. *Nat. Phys.*, 14(4):344–348, Apr 2018.
 - [52] Jing Peng, Yuhua Liu, et al. High phase purity of large-sized 1T'-MoS₂ monolayers with 2D superconductivity. *Adv. Mater.*, 31(19):1900568, 2019.
 - [53] Joseph Falson, Yong Xu, Menghan Liao, et al. Type-II Ising pairing in few-layer stanene. *Science*, 367(6485):1454–1457, 2020.
 - [54] Yi Liu, Ziqiao Wang, et al. Interface-induced zeeman-protected superconductivity in ultra-thin crystalline lead films. *Phys. Rev. X*, 8:021002, Apr 2018.

-
- [55] Yi Liu, Yong Xu, et al. Type-II Ising Superconductivity and Anomalous Metallic State in Macro-Size Ambient-Stable Ultrathin Crystalline Films. *Nano Lett.*, 20(8):5728–5734, 2020.
- [56] Markus König, Steffen Wiedmann, and Christoph Brüne others. Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells. *Science*, 318(5851):766–770, 2007.
- [57] J. J. Palacios, J. Fernández-Rossier, and L. Brey. Vacancy-induced magnetism in graphene and graphene ribbons. *Phys. Rev. B*, 77:195428, May 2008.
- [58] Oleg V. Yazyev and Lothar Helm. Defect-induced magnetism in graphene. *Phys. Rev. B*, 75:125408, Mar 2007.
- [59] Yan Wang, Yi Huang, You Song, et al. Room-temperature ferromagnetism of graphene. *Nano Letters*, 9(1):220–224, 2009. PMID: 19072314.
- [60] M Gmitra, S Konschuh, C Ertler, C Ambrosch-Draxl, and J Fabian. Band-structure topologies of graphene: Spin-orbit coupling effects from first principles. *Phys. Rev. B*, 80(23):235431, 2009.
- [61] A Avsar, J Y Tan, T Taychatanapat, J Balakrishnan, et al. Spin–orbit proximity effect in graphene. *Nat. Commun.*, 5(1):4875, 2014.
- [62] Zhiyong Wang, Chi Tang, Raymond Sachs, Yafis Barlas, and Jing Shi. Proximity-induced ferromagnetism in graphene revealed by the anomalous hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 114:016603, Jan 2015.
- [63] M V Feigel’man, M A Skvortsov, and K S Tikhonov. Proximity-induced superconductivity in graphene. *JETP Letters*, 88:747–751, 2008.
- [64] Yu A Bychkov and E I Rashba. Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 17(33):6039, nov 1984.
- [65] A. F. Morpurgo, J. Kong, C. M. Marcus, and H. Dai. Gate-controlled superconducting proximity effect in carbon nanotubes. *Science*, 286(5438):263–265, 1999.
- [66] Susumu Okada and Atsushi Oshiyama. Electronic structure of semiconducting nanotubes adsorbed on metal surfaces. *Phys. Rev. Lett.*, 95:206804, Nov 2005.
- [67] Yoshiteru Takagi and Susumu Okada. Energetics and electronic structure of semiconducting single-walled carbon nanotubes adsorbed on metal surfaces. *Phys. Rev. B*, 84:035406, Jul 2011.

-
- [68] Masayuki Hasegawa and Kazume Nishidate. Transfer doping of a metallic carbon nanotube and graphene on metal surfaces. *Phys. Rev. B*, 83:155435, Apr 2011.
- [69] Yuliang Mao, Zheng Guo, Jianmei Yuan, and Tao Sun. 1d/2d van der waals heterojunctions composed of carbon nanotubes and a gese monolayer. *Nanomaterials*, 11(6):1565, 2021.
- [70] Reinhold Egger and Karsten Flensberg. Emerging Dirac and Majorana fermions for carbon nanotubes with proximity-induced pairing and spiral magnetic field. *Phys. Rev. B*, 85(23):1–6, 2012.
- [71] Jelena Klinovaja, Suhas Gangadharaiah, and Daniel Loss. Electric-field-induced majorana fermions in armchair carbon nanotubes. *Phys. Rev. Lett.*, 108(19):1–5, 2012.
- [72] Magdalena Marganska, Lars Milz, Wataru Izumida, Christoph Strunk, and Milena Grifoni. Majorana quasiparticles in semiconducting carbon nanotubes. *Phys. Rev. B*, 97:075141, Feb 2018.
- [73] Lars Milz, Wataru Izumida, Milena Grifoni, and Magdalena Marganska. Transverse profile and three-dimensional spin canting of a Majorana state in carbon nanotubes. *Phys. Rev. B*, 100(15):155417, 2019.
- [74] R Saito, G Dresselhaus, and M S Dresselhaus. *Physical Properties of Carbon Nanotubes*. Imperial College Press, 1998.
- [75] Wataru Izumida, Kentaro Sato, and Riichiro Saito. Spin–orbit interaction in single wall carbon nanotubes: Symmetry adapted tight-binding calculation and effective model analysis. *J. Phys. Soc. Japan*, 78(7):074707, 2009.
- [76] E. Aktürk, O. Üzengi Aktürk, and S. Ciraci. Single and bilayer bismuthene: Stability at high temperature and mechanical and electronic properties. *Phys. Rev. B*, 94:014115, Jul 2016.
- [77] Jelena Klinovaja, Manuel J. Schmidt, Bernd Braunecker, and Daniel Loss. Carbon nanotubes in electric and magnetic fields. *Phys. Rev. B*, 84(8):1–22, 2011.
- [78] A. W. Holleitner, V. Sih, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom. Suppression of spin relaxation in submicron ingaas wires. *Phys. Rev. Lett.*, 97:036805, Jul 2006.
- [79] John Schliemann. Colloquium: Persistent spin textures in semiconductor nanostructures. *Rev. Mod. Phys.*, 89:011001, Jan 2017.
- [80] Martin Gmitra and Jaroslav Fabian. Graphene on transition-metal dichalcogenides: A platform for proximity spin-orbit physics and optospintronics. *Phys. Rev. B*, 92:155403, 2015.

- [81] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum spin hall effect in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 95:226801, Nov 2005.
- [82] Jien Cao, Qian Wang, and Hongjie Dai. Electron transport in very clean, as-grown suspended carbon nanotubes. *Nature Materials*, 4:745–749, 2005.
- [83] Aaron D. Franklin, Damon B. Farmer, and Wilfried Haensch. Defining and overcoming the contact resistance challenge in scaled carbon nanotube transistors. *ACS Nano*, 8(7):7333–7339, 2014. PMID: 24999536.
- [84] Adriaan J. M. Mackus, Nick F. W. Thissen, et al. Resist-free fabricated carbon nanotube field-effect transistors with high-quality atomic-layer-deposited platinum contacts. *Applied Physics Letters*, 110(1):013101, 01 2017.
- [85] Peter Sutter, Jerzy T. Sadowski, and Eli Sutter. Graphene on pt(111): Growth and substrate interaction. *Phys. Rev. B*, 80:245411, Dec 2009.
- [86] P. A. Khomyakov, G. Giovannetti, P. C. Rusu, G. Brocks, J. van den Brink, and P. J. Kelly. First-principles study of the interaction and charge transfer between graphene and metals. *Phys. Rev. B*, 79:195425, May 2009.
- [87] Amitesh Maiti and Alessandra Ricca. Metal–nanotube interactions – binding energies and wetting properties. *Chemical Physics Letters*, 395(1):7–11, 2004.
- [88] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim. Two-dimensional atomic crystals. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 102(30):10451–10453, 2005.
- [89] Ricardo Javier Peña Román, Fábio J R Costa Costa, Alberto Zobelli, et al. Band gap measurements of monolayer h-bn and insights into carbon-related point defects. *2D Materials*, 8(4):044001, jul 2021.
- [90] Georgy V. Pushkarev, Vladimir G. Mazurenko, Vladimir V. Mazurenko, and Danil W. Boukhvalov. Nature of interlayer bonds in two-dimensional materials. *The Journal of Physical Chemistry C*, 127(17):8148–8158, 2023.
- [91] Thomas Naimer, Klaus Zollner, Martin Gmitra, and Jaroslav Fabian. Twist-angle dependent proximity induced spin-orbit coupling in graphene/transition metal dichalcogenide heterostructures. *Phys. Rev. B*, 104:195156, Nov 2021.


(podpis wnioskodawcy)

Potwierdzam zgodność kopii wydruku z dokumentem elektronicznym:

Identyfikator dokumentu	206926.250495.208170
Nazwa dokumentu	Autoreferat PL (Załącznik - RPW_6393_2026) (Załącznik - RPW_11303_2026).pdf
Tytuł dokumentu	Autoreferat PL (Załącznik - RPW_6393_2026) (Załącznik - RPW_11303_2026)
Sygnatura dokumentu	
Data dokumentu	
Skrót dokumentu	83E26D4E118D308D4F894FDE407B5081204960FD
Wersja dokumentu	1.0
Data podpisu	29.05.2026 12:23:13
Podpisane przez	MARCIN KURPAS
Rodzaj certyfikatu	Certyfikat kwalifikowany podpisu elektronicznego

EZD 3.136.31.31.

Data wydruku: 16.07.2026

Autor wydruku: Parzyjagła Magdalena (samodzielny referent)