

## Streszczenie rozprawy doktorskiej

### Teoretyczne badania właściwości fononowych materiałów o strukturze dwuwymiarowej i ich heterostruktur z uwzględnieniem temperatury sieci krystalicznej

mgr inż. Konrad Wilczyński

Celem niniejszej rozprawy są badania właściwości drgań sieci krystalicznej (fononów) wybranych materiałów o strukturze dwuwymiarowej i ich heterostruktur z wykorzystaniem symulacji kwantowo-mechanicznych bazujących na teorii funkcjonału gęstości elektronowej (DFT), ze szczególnym uwzględnieniem wpływu temperatury tych struktur. W pracy rozważono następujące materiały dwuwymiarowe, bazujące na dichalkogenkach metali przejściowych: półprzewodnikowe monowarstwy  $1H\text{-MoS}_2$  i  $1H\text{-WS}_2$ , wielowarstwowe struktury  $2H\text{-WS}_2$ , heterostruktury  $1H\text{-MoS}_2/1H\text{-WS}_2$  z różnym wzajemnym ułożeniem warstw względem siebie, heterostrukturę  $1H\text{-MoS}_2/\text{grafen}$ , a także wysoce anharmoniczny materiał  $1T\text{-TiS}_2$ . Wszystkie te materiały są istotne z punktu widzenia potencjalnych aplikacji, pozwalając uzupełniać popularny monoatomowy grafen pod kątem własności elektrycznych, termicznych, optycznych, mechanicznych i chemicznych.

Przeprowadzone badania, bazujące na ścisłych podstawach teoretycznych przedstawionych w literaturze lat 60. XX wieku, uwzględniają obliczenia kluczowych efektów wywołanych anharmonicznością oddziaływań międzyatomowych, takich jak: rozszerzalność termiczna struktury oraz anharmoniczne oddziaływania międzyfononowe (w szczególności trój- i czterofononowe) – wpływające na zależność temperaturową efektywnych częstotliwości fononów i czasów ich życia, jak również na oczekiwane kształty spodziewanych widm spektroskopowych. Każdy z wymienionych efektów anharmonicznych zbadano oddzielnie, pozwalając lepiej zrozumieć ich naturę w poszczególnych rozważonych materiałach o strukturze dwuwymiarowej, jak również ich zależność od geometrii struktury.

Uzyskane teoretyczne zależności temperaturowe parametrów głównych modów fononowych (w szczególności aktywnych ramanowsko) są bardzo dobrze zgodne z dostępnymi pomiarami spektroskopowymi, wskazując na zdolność ich prawidłowego odtwarzania za pomocą obliczeń metodą DFT. Daje to szerokie perspektywy rozszerzenia przedstawionej metodologii badań na bardziej złożone zagadnienia, w szczególności dla znacznie bardziej skomplikowanych struktur o budowie warstwowej, jak również innych właściwości fizycznych uwarunkowanych propagacją fononów – np. przewodności termicznej.

**Słowa kluczowe:** fonony, anharmoniczność, temperatura, rozszerzalność termiczna, materiały 2D, struktury van der Waalsa, heterostruktury, dichalkogenki metali przejściowych, dwusiarczek molibdenu, dwusiarczek wolframu, dwusiarczek tytanu, rozpraszanie ramanowskie, teoria funkcjonału gęstości (DFT).

*Wilczyński*