

## Streszczenie

Niniejsza rozprawa doktorska składa się z cyklu siedmiu artykułów naukowych poświęconych modyfikacji właściwości elektronowych i spinowych wybranych struktur dwuwymiarowych. Badanymi materiałami były monowarstwy ołowiu na powierzchniach półprzewodników (krzemu i germanu) i modyfikowane warstwy dwutellurku molibdenu, silicenu oraz germanenu. Układ te zostały zbadane z wykorzystaniem metod obliczeniowych opartych na teorii funkcjonału gęstości z użyciem fal płaskich oraz pseudopotencjałów.

Badania przeprowadzone w ramach rozprawy doktorskiej pokazały, że olbrzymie rozszczepienie spinowe elektronowych pasm metalicznych w układach Pb/Si(111)-1×1 oraz Pb/Ge(111)-1×1 może osiągnąć wartość rzędu setek meV, bądź zostać wygaszone w zależności od miejsca adsorpcyjnego ołowiu. Efekt ten jest wynikiem niezerowej wartości orbitalnego momentu pędu  $L$ , który w połączeniu ze spinowym momentem pędu  $S$  prowadzi do rozszczepienia poprzez sprzężenie spin-orbita. Różnice obserwowane między konfiguracjami układu wynikają z charakteru oddziaływań na powierzchni. Powstające wiązania prowadzą do sprzężenia różnych orbitali atomowych i tym samym różnych wartości  $L$  dla stanów powierzchniowych. Analogiczne rozszczepienie wywołane adsorpcją Pb pokazano również dla układu Pb/germancen, dla którego faza 1×1 przewidziana została jako stabilna w oparciu o rachunek energii swobodnej oraz analizę widma fononów. Wpływ oddziaływań powierzchniowych na rozszczepienie spinowe został zbadany również dla słabo związanego układu Pb/MoTe<sub>2</sub>. W tym przypadku oddziaływania powierzchniowe ograniczają się wyłącznie do sił van der Waalsa, jednakże złamana symetria inwersyjna prowadzi do olbrzymiego rozszczepienia spinowego stanów elektronowych zarówno w warstwie Pb jak i MoTe<sub>2</sub>. Przeprowadzone badania ilustrują istotną rolę fizykochemii powierzchni w mechanizmie prowadzącym do rozszczepienia spinowego oraz wysoką zdolność do jego indukcji warstwami atomowymi metali ciężkich, co może znaleźć zastosowanie w spintronice.

Pokazano również, że małą aktywność chemiczną powierzchni MoTe<sub>2</sub> można zwiększyć poprzez naprężenie. Kontrolowana w ten sposób warstwa ułatwia zajście silnych interakcji na granicy układów MoTe<sub>2</sub>/Ge(111)-1×1 oraz dla heterostruktury materiałów dwuwymiarowych silicenu/MoTe<sub>2</sub>. Powstałe wiązania mają istotny wpływ na stany elektronowe struktur w pobliżu poziomu Fermiego, a także na rozkład gęstości ładunku na granicy materiałów. W rezultacie naprężenie może mieć znaczący wpływ na właściwości struktury, więc powinno być brane pod uwagę przy projektowaniu układów elektrycznych bazujących na MoTe<sub>2</sub>.

## Abstract

This doctoral thesis comprises seven scientific articles on the modification of electronic and spin properties of selected two-dimensional structures. The research included monolayers of lead on semiconductor surfaces (silicon and germanium) and modified sheets of molybdenum ditelluride, silicene, and germanene. The systems were investigated using computational methods based on density functional theory (DFT) employing the plane-wave and pseudopotential methods.

The study predicts that the giant spin splitting of metallic bands in Pb/Si(111)-1×1 and Pb/Ge(111)-1×1 systems can reach values of hundreds of meV or be suppressed depending on the adsorption site of lead. The effect originates from non-zero values of the orbital angular momentum  $\mathbf{L}$  present in the spin-split states, which in combination with the spin angular momentum  $\mathbf{S}$  gives rise to a spin splitting facilitated directly by the spin-orbit coupling. The differences observed between configurations of the system are due to the character of chemical bonds facilitated at the surface, which couple different atomic orbitals, and thus give rise to different values of  $\mathbf{L}$ . A similar splitting caused by Pb adsorption was also predicted for the Pb/germanene system, for which phase 1×1 was shown stable based on the surface formation free energy and phonon spectra analysis. The impact of surface interactions on spin splitting has also been studied for the weakly-bonded system of Pb/MoTe<sub>2</sub>. In this case, the surface interactions are predicted weak i.e, limited only to the van der Waals forces. However, the interface formation gives rise to a giant spin splitting of electronic bands in both the Pb and MoTe<sub>2</sub> layers. The conducted research illustrates the important role of surface interactions on spin splitting and also the high effectiveness of heavy-atomic layers in inducing the effect.

It has also been shown that the low chemical activity of MoTe<sub>2</sub> can be increased with the use of homogeneous tensile strain. The strain was shown to facilitate a strong chemical bonding at the interface of MoTe<sub>2</sub>/Ge(111)-1×1 and for a heterostructure of two-dimensional materials silicene/MoTe<sub>2</sub>. The resulting bonds have a significant impact on the electronic states of the system in the vicinity of the Fermi level, and also on the charge-density distribution on the interface. As a result, strain can have a significant impact on the electron properties of the structure. Hence, it should be accounted for when designing electronic devices based on MoTe<sub>2</sub>.