

Warszawa, dn. 13.10.2023

Załącznik nr 3

AUTOREFERAT
(w języku polskim)

Dr Magdalena Popielska (Birowska)

Spis treści

1	Dane osobowe	3
2	Posiadane dyplomy, stopnie naukowe	3
3	Informacja o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych	4
4	Omówienie osiągnięć	4
5	Informacja o wykazywaniu się istotną aktywnością naukową realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej, w szczególności zagranicznej	16
6	Informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę	18
7	Inne informacje, ważne punktu widzenia, dotyczące jego/jej kariery zawodowej	21
8		25

Dane osobowe

Imię i nazwisko Magdalena Popielska (nazwisko panieńskie *Birowska*)

Publikuję pod nazwiskiem panieńskim.

Data i miejsce urodzenia: 02.03.1984, Cieszyn (Polska)

mężatka, dwoje dzieci

strona domowa: <https://www.fuw.edu.pl/birowska/>

Posiadane dyplomy, stopnie naukowe

listopad 2014 - Doktor Nauk fizycznych

Instytut Fizyki Teoretycznej, Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski. Roprawa doktorska pt.: *Jednoosiowa magnetyczna anizotropia w rozcieńczonym półprzewodniku półmagnetycznym (Ga,Mn)As*; pod kierunkiem Prof. Dr. hab. Jacka A. Majewskiego.

Grudzień 2008 - Magister z Biofizyki

Wydział Fizyki, Uniwersytet Jagielloński. Temat pracy magisterskiej: *Zastosowanie wybranych metod fizycznych w badaniach czerwonych ciałek krwi*; pod kierunkiem Dr. hab. Kvetoslavy Burdy.

Czerwiec 2008 - Magister Fizyki (magisterium z wyróżnieniem)

Wydział Fizyki, Uniwersytet Jagielloński. Temat pracy magisterskiej: *Zastosowanie metod LDA do obliczania stanów elektronowych w wybranych układach nanoskopowych*; pod kierunkiem Prof. Dr. hab. Józefa Spałka.

Informacja o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych

- Od X.2020r. - obecnie - **Adiunkt badawczo-dydaktyczny**, Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski (UW).
- VIII.2017r. - VIII.2021r. - **Adiunkt naukowy**, kierownik projektu SONATA 12 (NCN), Wydział Fizyki, UW. Projekt pt.: *Teoretyczne badania właściwości strukturalnych, elektronicznych, magnetycznych i optycznych heterostruktur van der Waalsa zawierających dwuwymiarowe materiały warstwowe*. Projekt przedłużony o pół roku z powodu urlopu macierzyńskiego.
- XII.2014r. - VII.2017r. **Adiunkt naukowy**, Wydział Fizyki, UW. Zatrudnienie jako postdoc w projekcie Harmonia V, Narodowe Centrum Nauki (NCN), pt. *Modelowanie struktur grafenowych sprzężonych z metalami i izolatorami*. Zatrudnienie przedłużone o pół roku z powodu urlopu macierzyńskiego.

Omówienie osiągnięć

Jako osiągnięcia naukowe habilitantka, na podstawie Art. 219 ust. 14 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. o Prawie o szkolnictwie wyższym i nauce¹, wskazuje cykl publikacji powiązanych tematycznie zatytułowany:

Badanie właściwości fizycznych warstwowych materiałów typu van der Waalsa metodami ab initio.

¹Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, Art. 219 (2018), Rozdział 3 strony 121-122

Na cykl publikacji powiązanych tematycznie składa się 8 prac opublikowanych w latach 2019-2023 [2, 4–7, 28, 30, 36]:

- H1. **M. Birowska**; J. Urban, M. Baranowski, D. Maude; P. Płochocka, N. Gonzalez Szwacki, *The impact of hexagonal boron nitride encapsulation on the structural and vibrational properties of few layer black phosphorus*, Nanotech. 30, 195201 (2019)
IF: **3.953**, Punktacja MNiSW: **100 pkt.**
- H2. T. Necio, **M. Birowska**; *Supercell-core software: a useful tool to generate an optimal supercell for vertically stacked nanomaterials*, AIP Advances 10, 105105 (2020)
IF: **1.697**, Punktacja MNiSW: **70 pkt.**
- H3. **M. Birowska**, M.E. Marchwiay, C. Draxl, J.A. Majewski; *Assessment of approaches for dispersive forces employing graphone as a case study*, Computational Materials Science 186, 109940 (2021)
IF: **3.572**, Punktacja MNiSW: **100 pkt.**
- H4. **M. Birowska**, Paulo E. Faria Junior, J. Fabian, J. Kunstmann; *Large exciton binding energies in $MnPS_3$ as a case study of a van der Waals layered magnet*, Physical Review B, 103, L121108 (2021)
IF: **3.908**, Punktacja MNiSW: **140 pkt.**
- H5. M. Rybak, T. Woźniak, **M. Birowska**, F. Dybała, A. Segura, K. J. Kapcia, P. Scharoch and R. Kudrawiec; *Stress-Tuned Optical Transitions in Layered $1T-MX_2$ ($M=Hf, Zr, Sn$; $X=S, Se$) Crystals*, Nanomaterials 12, 3433 (2022)
IF: **5.719**, Punktacja MNiSW: **100 pkt.**
- H6. C. Autieri, G. Cuono, C. Noce, M. Rybak, K. M. Kotur, C. E. Agrapidis, K. Wohlfeld, **M. Birowska**; *Limited ferromagnetic interactions in monolayers of MPS_3 ($M=Mn, Ni$)*, Journal of Physical Chemistry C 126, 6791 (2022)
IF: **4.177**, Punktacja MNiSW: **140 pkt.**
- H7. R. Basnet, K. Kotur, M. Rybak, C. Stephenson, S. Bishop, C. Autieri, **M. Birowska**, J. Hu, ; *Controlling magnetic exchange and anisotropy by non-magnetic ligand substitution in layered MPX_3 ($M = Ni, Mn$; $X = S, Se$)*, Phys. Rev. Research 4, 023256 (2022)
IF: **4.20**, Punktacja MNiSW: **20 pkt.**
- H8. W.M. Linhart, M. Rybak, **M. Birowska**, P. Scharoch, K. Mosina, V. Mazanek, D. Kaczorowski, Z. Sofer, R. Kudrawiec; *Optical markers of magnetic phase transition in $CrSBr$* , Journal of Materials Chemistry C 11, 8423-8430 (2023)
IF: **8.067**, Punktacja MNiSW: **140 pkt.**

Omówienie rozprawy habilitacyjnej

"Badanie właściwości fizycznych warstwowych materiałów typu van der Waalsa metodami ab initio."

1. Wprowadzenie

"There is plenty of room at the bottom" to jeden ze słynnych cytatów fizyka Richarda Feynmana, wypowiedzianych podczas wykładu na spotkaniu Amerykańskiego Towarzystwa Fizycznego 29 grudnia 1959 roku [13]. Prof. Feynman omówił możliwości manipulowania materią w skali atomowej, wprowadzając słuchaczy w świat nanotechnologii, zanim wogóle ten termin został wymyślony. Prof. Feynman już wtedy zdał sobie sprawę, że wiele zupełnie nowych zjawisk fizycznych mogłoby się ujawnić gdybyśmy mieli możliwość kontrolowania liczby warstw, a tym samym wymiarowości badanych materiałów.

W szczególności uzyskanie monowarstwy grafenu przy użyciu techniki taśmy klejącej (*ang. scotch tape method*), zainicjowało badania nad innymi materiałami warstwowymi [33], które stały się możliwe do otrzymania w skali atomowej. Materiały 2D są szczególnie ciekawe, bo wykazują zupełnie inne właściwości niż ich odpowiedniki objętościowe (3D). W szczególności, elektrony w grafenie można opisać jako bezmasowe fermiony Diraca, które posiadają niezwykle wysoką ruchliwość nośników nawet w temperaturze pokojowej [3]. Jednakże, grafen to metal, co ogranicza jego zastosowania jako podstawowego komponentu w tranzystorach [38]. Zdolność do przełączania sygnałów elektrycznych jest podstawą wszystkich nowoczesnych urządzeń elektronicznych, od komputerów po smartfony. Chociaż zastosowano wiele podejść aby otworzyć przerwę pasmową grafenu [12], naukowcy zaczęli poszukiwać, a następnie badać nowe materiały warstwowe, z których można uzyskać monowarstwy. Obecnie dostępnych jest wiele różnych materiałów warstwowych, które wykazują różne właściwości elektronowe, wliczając izolatory, metale, ferroelektryki, nadprzewodniki, materiały magnetyczne itp. Materiały warstwowe stanowią doskonałą platformę testową badania nowych zjawisk zależnych od wymiarowości układu. W szczególności dzięki słabym siłom dyspersyjnym typu van der Waalsa (vdW), atomowo cienkie warstwy można oderwać wzajemnie od siebie, albo od podłoża co daje im przewagę nad materiałami konwencjonalnymi, w których występują niewysyczone wiązania przy powierzchni i proces odłączenia od podłoża wymaga użycia skomplikowanych metod. Co więcej, materiały te wykazują doskonałe właściwości mechaniczne, elastyczne, co czyni je łatwo dostępnymi w inżynierii materiałowej, a także daje możliwość ich integracji z różnymi heterostrukturami [32]. Dodatkowo, materiały te łatwo poddają się funkcjonalizacji chemicznej. Modulowane właściwości materiałów warstwowych sprawiają, że mogą być one potencjalnie wykorzystane w przemyśle elektronicznym, w spintronice czy jako nowoczesne czujniki (sensory), lub materiały służące do magazynowania energii.

Istnieje wiele czynników modyfikujących właściwości fizyczne materiałów warstwowych, m.in. ilość warstw, ich różna konfiguracja ułożenia, funkcjonalizacja chemiczna, interkolacja jonami lekkimi, naprężenia, bliskość innych warstw, domieszkowanie, czynniki zewnętrzne takie jak pole elektryczne. Przez ostatnie 5 lat moja działalność badawcza związana była z tematyką materiałów warstwowych, w których skupiałam się na bada-

niu właściwości strukturalnych, elektronowych, optycznych czy magnetycznych. W szczególności, w rozprawie habilitacyjnej rozważam poniższe aspekty właściwości fizycznych materiałów warstwowych typu vdW:

- (I) efekty fizyczne indukowane naprężeniem;
- (II) efekty fizyczne indukowane podłożem;
- (III) wpływ zmiany wymiarowości układu;
- (IV) wpływ domieszkowania na właściwości materiałów warstwowych;
- (V) zmiana właściwości fizycznych indukowane porządkiem magnetycznym

Powyższe aspekty stanowią moje osiągnięcia naukowe i są omawiane z użyciem różnych materiałów warstwowych tj.:

- grafen;
- BP - czarny fosfor;
- hBN - heksagonalny azotek boru;
- TMDs - dichalkogenki metali przejściowych (MX_2 , $M=Hf, Zr, Sn$; $X=S, Se$);
- MPX₃ - trichalkogenki fosforu metali przejściowych ($M=Mn, Ni$, $X=S, Se$);
- CrSBr.

W celu zapewnienia wiarygodnego ilościowego opisu powyższych efektów fizycznych, większość obliczeń zostało przeprowadzonych w ramach teorii funkcjonału gęstości (DFT). W przypadku selektywnych właściwości, takich jak energie wiązań ekscytonów czy właściwości magnetyczne, użyto efektywnych modeli sparametryzowanych obliczeniami *ab initio*, w szczególności wykorzystano odpowiednio efektywne modele oparte na równaniu Bethe-Salpeter czy modelu Hubbarda.

2. Metodologia

Obliczenia *ab initio* w ramach teorii funkcjonału gęstości (z ang. *Density Functional Theory, DFT*) [19] to potężne narzędzie obliczeniowe do badania atomistycznych właściwości nanomateriałów. Teoria DFT jest kluczowym narzędziem badawczym współczesnej fizyki teoretycznej, chemii kwantowej czy inżynierii materiałowej. Metoda DFT jest jedną najdokładniejszych metod przewidywania struktury pasmowej nanomateriałów, a także jest dalej intensywnie rozwijana w wielu aspektach właściwości materiałowych. Metoda DFT nie tylko dostarcza fizyko-chemicznych wyjaśnień w interpretacji danych eksperymentalnych, ale także przewiduje ilościowo właściwości fizyko-chemiczne nieosiągalne w ramach eksperymentów. Metodologia DFT bazuje na formalizmie gęstości elektronowej w przeciwieństwie do większości pozostałych metod typu *ab initio* opartych na formalizmie funkcji falowych. Praktyczną jej realizacją jest metoda Kohn-Shama która sprowadza układ oddziaływujących elektronów (problem wielu ciał) do układu równań jednocząstkowych opisujących nieoddziaływujące wzajemnie elektrony. Głównym problemem metody DFT jest brak dokładnej postaci funkcjonału korelacyjno-wymennego (z ang. *XC, X-exchange, C-correlation*). Ogólnie rzecz biorąc, dokładność metody DFT silnie zależy od

wyboru postaci funkcjonału XC [39]. Większość obliczeń DFT opiera się na standardowych funkcjonałach do których należy klasa funkcjonałów opartych na teorii jednorodnego gazu elektronowego, czyli metodzie lokalnej gęstości (LDA, z *ang. local density approximation*) [22] lub na klasie uwzględniającej zależność energii od gęstości elektronowej oraz jej gradientu tzw. funkcjonał GGA (z *ang. generalized gradient approximation*) [34]. Wiadomo, że standardowe klasy funkcjonałów tylko częściowo anulują samoodziaływanie elektronu z własną gęstością ładunku (z *ang. self-interaction error*), powodując poważne niedoszacowanie przerwy pasmowej (E_g) półprzewodników. Z uwagi na to, iż energia samooddziaływania jest zawsze dodatnia, podwyższa ona energię zlokalizowanych stanów (ważne dla atomów z bloku d i f), powodując w konsekwencji przestrzenną delokalizację elektronów. Jedną z niepożądanych konsekwencji tego samoodziaływania jest metalizacja układu oraz nieprawidłowo przewidywane momenty magnetyczne zlokalizowane na tych atomach. Metoda DFT+U to jedno z podejść zaproponowanych do poprawy tego samooddziaływania. W metodzie DFT+U ([18]), wprowadza się odpychanie pomiędzy elektronami (zwykle na orbitalach typu d lub f) tzw. człon U . Z uwagi na podobieństwo tego członu z modelem Hubbarda, określa się go jako parametr Hubbard U . Poprawka Hubbarda może prowadzić do złamania symetrii powodując otwarcie przerwy pasmowej.

Innym podejściem, które można zastosować, jest użycie funkcjonałów hybrydowych. Funkcjonał hybrydowy konstruuje się jako liniową kombinację funkcjonału dokładnej wymianny otrzymany z podejścia Hartree-Focka (HF) i funkcjonału korelacyjnego otrzymanego z innych źródeł (np. częściowo korzysta się ze standardowego funkcjonału LDA i metod empirycznych) (zob. ref. [21]). W teorii HF człon wymiany niweluje błąd samooddziaływania występujący w części Hartree (człon odpychania kulombowskiego). Należy zauważyć, że korelacja elektronów nie jest uwzględniona w teorii HF. Człon wymiany ma charakter dalekozasięgowy i nie jest ekranowany, co skutkuje wysokimi energiami wzbudzenia i dużym przeszacowaniem E_g w metodzie HF. Stąd połączenie niedoszacowanej przerwy pasmowej uzyskanej za pomocą LDA (lub GGA) i przeszacowanej przerwy pasmowej HF generalnie zapewnia bardziej realistyczne wartości E_g , co jest zaletą stosowania funkcjonałów hybrydowych. Warto wspomnieć, że błąd samooddziaływania nie jest w pełni wyeliminowany w tym podejściu.

Ponadto, układy warstwowe vdW wymagają prawidłowego opisu sił dyspersyjnych, których źródłem są korelacje elektronowe. Siły dyspersyjne (siły Londona lub vdW), to siły elektrostatyczne pomiędzy indukowanymi dipolami, pojawiającymi się na skutek chwilowych zmiennych rozkładów ładunków. Należy zauważyć, że standardowe funkcjonały XC nie uwzględniają dalekozasięgowych sił oddziaływania typu van der Waalsa. Te siły w obliczeniach DFT uwzględnia się na różnym poziomie dokładności. Powszechnie stosowaną metodą jest podejście Grimme'a (DFT-D) [17], które nie wpływa na koszt obliczeń, z uwagi na poprawkę dyspersyjną którą dodaje się do całkowitej energii uzyskanej z DFT (E_{tot}^{KS-DFT}). Bardziej dokładną metodą, jest uwzględnienie dalekozasięgowych sił van der Waalsa w nielokalnej części funkcjonału korelacyjnego (vdW-DF) (patrz praca przeglądowa Ref. [8]). Metoda vdW-DF pierwotnie zaproponowana przez Dionę składa się z lokalnego funkcjonału korelacyjno-wymiennego (XC), oraz nielokalnej części funkcjonału XC, która w przybliżeniu opisuje siły dyspersyjne. Ponadto, dla układów, w których oddziaływanie spin-orbita jest istotne, zostało ono uwzględnione na poziomie pseudopo-

tencjałów oraz przy użyciu formalizmu niekollinearnego magnetyzmu (ang. non-collinear magnetism). Wszystkie wyżej wymienione funkcje i podejścia zostały zaimplementowane w oprogramowaniu VASP [23, 24] i były używane w publikacjach [H1-H8]. Obliczenia zostały wykonane przy użyciu sprzętu obliczeniowego zainstalowanego w Interdyscyplinarnym Centrum Modelowania ICM, UW oraz w Cyfronetecie w Krakowie, w ramach programu PL-Grid Polska Infrastruktura Wspomagania Obliczeń w Europejskiej Przestrzeni Badawczej.

2.1. Efekty fizyczne indukowane naprężeniem (H2, H5).

"Straintronika" (ang. "straintronics=strain+electronics") to nowa interdyscyplinarna dziedzina nauki w której metody inżynierii naprężeń w kryształach są wykorzystywane do opracowywania nowoczesnych urządzeń dla technologii informacyjnych, czujników czy energooszczędnych urządzeń nowej generacji. W szczególności, termin ten odnosi się do nowego obszaru badawczego w fizyce materii skondensowanej, w której efekty fizyczne wywołane naprężeniem w ciałach stałych są wykorzystywane do kontroli i manipulacji właściwościami elektronowymi tych materiałów.

Powszechnie wiadomo, że aby zetknąć ze sobą dwa materiały półprzewodnikowe trzeba wziąć pod uwagę ich niedopasowanie sieciowe (ang. lattice mismatch), które jest krytyczną kwestią dla półprzewodników takich jak Si, Ge czy materiałów z grupy III-V, takich jak InAs/GaAs, w których występują wiązania kowalencyjne. Niedopasowanie sieciowe często prowadzi do powstania defektów i dyslokacji na skutek silnych naprężeń w strukturze, na granicy ich styku. Jedną z przyczyn pojawienia się defektów na interfejsie jest obecność tzw. niewysyconych wiązań. W przypadku wertykalnego styku dwóch materiałów warstwowych ten problem nie istnieje.

Z drugiej strony, pionowo ułożone warstwy zapewniają nowe mechanizmy relaksacji naprężeń przy niezwykle wysokim niedopasowaniu sieci, ze względu na słabe siły vdW między sąsiednimi warstwami, umożliwiając inżynierię struktury pasmowej wywołaną naprężeniem. Materiały te reprezentują nową klasę kryształów znanych jako heterostrukтуры vdW [14], które mogą wykazywać zupełnie nowe zjawiska fizyczne w porównaniu do ich izolowanych odpowiedników 2D. W szczególności, w grafenie wykryto niekonwencjonalne nadprzewodnictwo które może być precyzyjnie kontrolowane przez "kąt skręcenia" sąsiednich warstw atomowych [9, 10].

Obecnie, badania właściwości materiałów 2D opierają się głównie na obliczeniach elektronowej struktury pasmowej w ramach teorii DFT, która jest aktualnie uważana za jedną z najdokładniejszych metod *ab initio*. Powszechnie dostępne pakiety służące do obliczeń kwantowo-mechanicznych, tj. VASP [23, 24] Quantum Espresso [15] i SIESTA [41] wykorzystują periodyczne warunki brzegowe, w których stosowane jest podejście superkomórkowe. Takie dokładne obliczenia są możliwe tylko dla maksymalnie kilkuset atomów. W przypadku wertykalnych heterostruktur, układanie materiałów 2D o różnych parametrach sieci lub wykazujących różną lateralną symetrię kryształu, wymaga zwykle użycia bardzo dużej superkomórki, składającej się z tysięcy atomów. W publikacji [H2] przedstawiamy opracowane oprogramowanie (darmowy kod źródłowy, dostępne jako moduł Pythona [1]) które umożliwia znajdowanie optymalnych superkomórek dla heterostruk-

tur vdW składających się z dwóch lub więcej kryształów 2D. Oprogramowanie umożliwia znalezienie optymalnej superkomórki, tj. takiej o małym rozmiarze i małych napeżeniach warstw. W szczególności, opracowany przez nas pakiet przeszukuje wszystkie możliwe superkomórki składające się z wielokrotności komórek pierwotnych dla danego kąta obrotu między górną i dolną strukturą 2D. Oprogramowanie pozwala na określenie optymalnych "magicznych kątów" (z ang. magic angles) pomiędzy sąsiednimi wertykalnie ułożonymi materiałami 2D, a także wynikającymi z nich wzorami *Moiré* (z ang. *Moiré patterns*). Oprogramowanie umożliwia również konstrukcję optymalnych superkomórek dla danego kąta skręcenia, a także generację superkomórek dla wybranego naprężenia, co jest niezwykle istotne w przypadku badań eksperymentalnych, gdzie rozkład naprężeń może być badany przy pomocy mikroskopii sił atomowych (AFM), skaningowej mikroskopii tunelowej (STM) lub spektroskopii Ramana. Nasze oprogramowanie poprawnie przewiduje kąty magiczne i wzory *Moiré* dla warstw grafenowych.

Inżynieria naprężeń jest szeroko stosowana w przemyśle półprzewodników. W szczególności, w przypadku jednoosiowych lub dwuosiowych naprężeń rozciągających, ruchliwość nośników w tranzystorze zbudowanym na krzemie ulega znaczącemu zwiększeniu [45]. Jednakże, konwencjonalne kryształy półprzewodnikowe wytrzymują tylko bardzo małe naprężenia, co znacznie ogranicza takie zastosowanie. W porównaniu z konwencjonalnymi materiałami, kryształy 2D mają większą zdolność do deformacji i mogą wytrzymać większe odkształcenia sprężyste, np. warstwa grafenu może wytrzymać naprężenia rzędu 25 % bez pęknięć w swojej strukturze [11]. W artykule [H5] wyznaczyliśmy optycznie aktywne przejścia w strukturze pasmowej związków 1T- MX_2 ($\text{M}=\text{Hf}, \text{Zr}, \text{Sn}$; $\text{X}=\text{S}, \text{Se}$). Zbadaliśmy wpływ zewnętrznych naprężeń hydrostatycznych, jednoosiowych i dwuosiowych na wyznaczone przejścia optyczne. We wszystkich badanych przypadkach, przejścia były optycznie aktywne, a wyznaczona polaryzacja światła znajdowała się w płaszczyźnie. W pracy wyznaczyliśmy ilościowe trendy energetyczne przejść optycznych pod wpływem różnych naprężeń zewnętrznych, wyznaczając tzw. liniowe współczynniki ciśnienia. Największe współczynniki ciśnienia zostały przewidziane w przypadku naprężeń jednoosiowych dla związków zawierających cynę Sn. Ujemne współczynniki ciśnienia wskazują na zawężenie przerwy pasmowej. Przy ciśnieniu hydrostatycznym przewidzieliśmy przejścia typu półprzewodnik - metal. Obliczone przez nas współczynniki ciśnienia są w doskonałej zgodności z wartościami zmierzonymi eksperymentalnie.

2.2. Efekty fizyczne indukowane podłożem (H1, H3, H4)

Podłoże w materiałach warstwowych odgrywa ważną rolę, ponieważ może ono wpływać na właściwości materiału np. poprzez tzw. efekty bliskości (z ang. proximity effects), lub poprzez naprężenia może wpływać na strukturę i wydajność materiału. Z drugiej strony, dobierając odpowiednio podłoże można zapewnić mechaniczne wsparcie dla materiału warstwowego, zapewniając jego stabilność. Powszechnie wiadomo, że wiele materiałów warstwowych jest niezwykle wrażliwych na lokalne środowisko i warunki otoczenia. Czarny fosfor (z ang. Black Phosphorus, BP) to jeden z ekstremalnych przypadków materiałów warstwowych, w którym wilgoć, doprowadza do jego degradacji w ciągu zaledwie kilku minut. Enkapsulacja to jedna z metod która może zapobiec strukturalnej i chemicznej degradacji materiałów warstwowych. Polega ona na otoczeniu materiału 2D innym mate-

riałem dwuwymiarowym.

W artykule [H1] badamy wpływ podłoża hBN na właściwości strukturalne i dragnia sieci krystalicznej BP. Ujawniamy, że enkapsulacja hBN modyfikuje właściwości strukturalne warstw BP. W szczególności enkapsulacja hBN powoduje wypłaszczenie pofałdowanych warstw czarnego fosforu poprzez zwiększenie długości wiązań wewnątrzwarstwowych i tzw. kąta spłaszczenia. W pracy pokazujemy że warstwy z powierzchni BP inaczej oddziałują z sąsiadującymi warstwami niż warstwy głębiej położone, co odzwierciedla się w ich różnej sztywności. Co więcej, konsekwencją tego efektu jest rozszczepienie wysoko częstotliwościowego fononu optycznego obserwowanego w widmie Ramana A_g^1 , który przesunięty jest ku niższym częstotliwościom. W pracy demonstrujemy [H1], że enkapsulacja hBN powoduje powstawanie naprężeń w warstwach BP, powodując dodatkowe dalsze przesunięcie ku czerwieni optycznie aktywnego modu Ramana A_g^1 . Strategia enkapsulacji otwiera więc drzwi do kontrolowanej przez podłoże inżynierii naprężeń dla atomowo cienkich kryształów.

W procesie uwodornienia grafenu, rola podłoża jest także kluczowa [31,35,46]. Nasze badania [H3] rzuciły światło na fizyczne mechanizmy uwodornienia grafenu zarówno w próżni, jak i w pobliżu powierzchni metalicznej. W szczególności, nasze wyniki ujawniają, że adsorpcja atomów wodoru do warstwy grafenowej jest silnie modyfikowana podłożem metalicznym, co związane jest z tworzeniem się tzw. pseudo-kowalencyjnych (ang. semi-covalent) wiązań pomiędzy warstwą grafenu i podłożem niklowym. W szczególności, adsorpcja warstwy wodoru na grafenie jest wzmacniana (silniejsza) w obecności metalicznej powierzchni. Innymi słowy, podłoże niklowe działa jako stabilizujące podłoże ułatwiające tworzenie się uwodornionego grafenu.

Wpływ podłoża odgrywa także kluczową rolę w zastosowaniach optoelektronicznych. W szczególności, stała dielektryczna to podstawowa wielkość fizyczna, która charakteryzuje zdolność materiałów do ekranowania pola elektrycznego, co czyni ją podstawową właściwością materiału w przypadku określenia wydajności i funkcjonalności urządzeń optoelektronicznych opartych na materiałach 2D. Przede wszystkim, właściwości optyczne tj. energie wiązań ekscytonów są silnie związane z ekranowaniem dielektrycznym otoczenia. W artykule [H4] pokazujemy, że w przypadku monowarstwy $MnPX_3$ energia wiązania ekscytonów jest silnie modyfikowana podłożem. W szczególności, energia wiązań ekscytonów może zostać zredukowana około dwa do trzech razy, odpowiednio w przypadku podłoża SiO_2 i hBN w porównaniu do środowiska próżni.

2.3. Wpływ zmiany wymiarowości układy na fizyczne właściwości [H1, H4]

W materiałach objętościowych elektrony zajmują pasma energetyczne, które są wynikiem ciągłego rozkładu poziomów energetycznych. W przypadku materiałów dwuwymiarowych, ograniczenie w kierunku prostopadłym do warstwy powoduje kwantyzację poziomów energetycznych w zredukowanym wymiarze. W strukturach typu van der Waalsa, właściwości zależne od ilości warstw są intensywnie badane od 2010 roku, kiedy zaobserwowano po raz pierwszy efekt ograniczenia kwantowego (ang. quantum confinement) dla disiarczku molibdenu MoS_2 [43], który wykazywał silną fotoluminescencję w przypadku atomowo cienkiej warstwy. W szczególności, dalsze badania teoretyczne wykazały

iż monowarstwa MoS_2 , posiada prostą przerwę pasmową, podczas gdy jej objętościowy odpowiednik posiada przerwę o charakterze skośnym. Wyniki te wywołały podekscytowanie w świecie naukowym, dając możliwość inżynierii struktury elektronowej materiałów poprzez modyfikację ilości warstw.

W pracy [H4] wykazaliśmy, że przerwa pasmowa materiału warstwowego MnPS_3 zmienia swój charakter z przerwy skośnej (objętościowy materiał) do prostej (monowarstwa), czemu towarzyszy wzrost fundamentalnej przerwy o 200 meV (DFT+U(3eV)) oraz niewielka zmiana stałej sieci o 0,02 Å. Co więcej, w przypadku monowarstwy, ekstrema pasm występują w punkcie K wysokiej symetrii w pierwszej strefie Brillouina (BZ) a dla objętościowego materiału są w punktach k o niskiej symetrii. W przypadku właściwości transportowych czy termoelektrycznych, kluczowym aspektem jest krzywizna pasm w strukturze elektronowej. Krzywizna najwyższego zapełnionego pasma walencyjnego (z ang. valence band minimum, VBM) oraz najniższego niezapełnionego pasma przewodnictwa (ang. conduction band minimum, CBM) nie zależy od ilości warstw w materiale MnPS_3 . W szczególności, obliczenia ujawniają porównywalne składowe tensora masy efektywnej nośników (elektronów i dziur) w płaszczyźnie dla monowarstwy i objętościowego materiału. Niewielkie rozbieżności są obserwowane dla wyznaczonych osi głównych tensora masy efektywnej w przestrzeni odwrotnej, które pokrywają się z kartezyjskimi osiami dla monowarstwy, podczas gdy dla układu objętościowego tylko jedna oś jest równoległa do kierunku krystalograficznego [010], pozostałe osie są przesunięte względem kartezyjskich osi.

Co więcej, w pracy [H4] po raz pierwszy przewidujemy ogromne energie wiązań ekscytonów z krawędzi pasm, przekraczające energię 1 eV w przypadku monowarstwy otoczeniu w próżni. Należy podkreślić, iż przewidziane przez nas wartości energii wiązań ekscytonów znacznie przekraczają energię wiązań ekscytonów szeroko badanej klasy materiałów TMDs. Energie wiązań ekscytonów silnie zależą od ilości warstw, co związane jest głównie z zmianą ekranowania pola elektrycznego materiału. Efektem ograniczenia kwantowego jest 4-krotny wzrost energii wiązania ekscytonów dla monowarstwy w porównaniu z jego objętościowym odpowiednikiem.

Co więcej, w pracy [H1] pokazaliśmy że drganie modu fononowe A_g^1 dla czarnego fosforu (BP) silnie zależy od ilości warstw. W szczególności, dla tego optycznie aktywnego modu Ramanowskiego występuje przesunięcie ku wyższym częstotliwościom obserwowane dla monowarstwy w odniesieniu do układu 5-warstwowego. Dodatkowo, warstwy BP wykazują anomalną ewolucję częstotliwości fononów wraz ze wzrostem liczby warstw.

2.4. Wpływ domieszkowania na właściwości materiałów warstwowych [H3, H6, H7]

Domieszkowanie odnosi się do celowego wprowadzania pewnych rodzajów zanieczyszczeń, atomów, do materiału w celu modyfikacji jego właściwości. Domieszkowanie jest kluczowym procesem w produkcji półprzewodników, umożliwiającym projektowanie i produkcję różnych urządzeń elektronicznych o określonych właściwościach elektrycznych. W szczególności, implementacja jonów w technologiach krzemowych odegrała ważną rolę w technologiach wytwarzania układów scalonych, głównie cyfrowych, składających się z tranzystorów MOS (ang. Metal-Oxide Semiconductor) o przeciwnym typie przewodnic-

twa i połączonych w taki sposób, że w ustalonym stanie logicznym przewodzi tylko jeden z nich. Jednakże, technika implementacji jonów stanowi wyzwanie dla materiałów warstwowych, ponieważ może prowadzić do uszkodzenia cienkich warstw. W związku z tym, wciąż poszukuje się nowych podejść związanych z kwestią domieszkowania. Ostatnie badania wykazały, że dla tranzystora zbudowanego z heterostruktury vdW, warstwa MoS₂ może być zdalnie domieszkowana poprzez kontrolowany transfer ładunku z domieszek atomów przyłączonych do jej powierzchni [27].

W pracy [H3] zbadaliśmy właściwości energetyczne i zmiany strukturalne wywołane przyłączeniem wodoru do powierzchni grafenu. Wykazaliśmy, że profil energetyczny adsorpcji wykazuje dwa minima. Pierwsze odpowiada silnej adsorpcji - chemisorpcji, dla odległości pomiędzy atomem wodoru a warstwą grafenową równą 1,2 Å. Drugie minimum, odpowiada słabej adsorpcji typu van der Waalsa (tzw. fizysoadsorpcja), która występuje dla odległości wodoru około 2,5-3 Å od grafenu, w zależności od użytego rodzaju funkcjonu korelacyjno-wymiennego i zastosowanej poprawki uwzględniającej słabe siły vdW. Nasze badania wykazały, iż chemisorpcja atomów wodoru powoduje duże zmiany strukturalne warstwy grafenowej. W szczególności, na skutek przyłączenia atomów wodoru, warstwa grafenowa ulega pofałdowaniu nawet o 0,33 Å w kierunku prostopadłym do warstwy. Tak duże zmiany strukturalne w warstwie grafenowej mogą wpływać na jej właściwości elektronowe, ponieważ przerwa pasmowa może być kontrolowana przez stopień pokrycia wodorem [42].

W szczególności, w artykule [H7] zbadaliśmy domieszkowanie podstawieniowe atomów niemagnetycznych (chalkogenów) w układach warstwowych MnPS_{3-x}Se_x i NiPS_{3-x}Se_x ($0 \leq x \leq 3$). Nasza praca ujawnia różny charakter trendu ewolucji temperatury Néela wraz ze zmianą stopnia domieszkowania x w materiałach zawierających Mn i Ni, z silniejszym trendem obserwowalnym dla NiPS_{3-x}Se_x. Pokazaliśmy, iż efekt ten związany jest z większymi wartościami całek wymiany J , dla struktur zawierających Ni w porównaniu do odpowiadających im struktur zawierających Mn. Wykazaliśmy, że dominującym mechanizmem wymiennym, jest oddziaływanie bezpośrednie (M-M) w związkach w MnPS₃, podczas gdy pośrednie oddziaływanie wymienne (M-X-M, nadwymiana) ma znaczenie i prowadzi do FM ustawienia spinów dla najbliższych sąsiadów w NiPS₃ [2]. Dodatkowo pokazaliśmy, że podstawienie chalkogenowe jest dobrą metodą kontrolowania anizotropii magnetycznej w materiałach warstwowych, co znajduje odzwierciedlenie w efektywnym strojeniu osi łatwej magnetyzacji i przejściu typu spin-flop (SF). Taki przeobrażalny magnetyzm ujawniony przez podstawienie niemagnetyczne stanowi użyteczną metodę inżynierii dla struktur wykazujących niskowymiarowy magnetyzm.

Kryształy warstwowe MPX₃ mogą być także domieszkowane jonami metali przejściowych. W pracy [H6] rozważamy teoretycznie (DFT+U) różne typy domieszek magnetycznych podstawionych w podsić złożoną z atomów metalu gospodarza. Rozważamy mieszane całki wymiany (domieszka-gospodarz) pomiędzy różnymi atomami magnetycznymi dla najbliższych sąsiadów (do trzech łącznie) przy ustalonej koncentracji domieszek dla stopów (M_{3/4}X_{1/4})PS₃, gdzie M=Mn, Ni i X=Mn, Ni, Cr. Wykazaliśmy, że domieszki magnetyczne nie wpływają na zmianę uporządkowania magnetycznego obserwowanego dla czystych związków. Jednakże, w przeciwieństwie do czystych związków, mieszane całki wymiany dla pierwszych i trzecich sąsiadów są tego samego rzędu wielkości, co może

prorowadzić do frustracji różnych porządków antyferromagnetycznych, a w konsekwencji może być jedną z przyczyn obserwowanej niższej temperatury Néela dla stopów. Dodatkowo wykazaliśmy, że domieszki Mn i Ni mają tendencję do tworzenia klastrów, podczas gdy jony Cr wolą być losowo rozmieszczone w sieci gospodarza. Rozważane stopy klasyfikujemy jako izolatory Motta, które generalnie wykazują mniejsze przerwy pasmowe w porównaniu z czystymi związkami. Co więcej, pokazaliśmy, iż materiały MPX_3 wykazują silny antyferromagnetyzm, a uzyskanie ferromagnetyzmu dla tych związków nie da się łatwo indukować poprzez domieszkowanie podstawieniowe pierwiastkami magnetycznymi. Niemniej jednak, w przypadku zadanego, specyficznego rozmieszczenia domieszek magnetycznych w $NiPS_3$, może pojawić się faza ferrimagnetyczna, z uwagi na różną długość spinów dwóch podsieci magnetycznych.

2.5. Zmiana właściwości fizycznych indukowane porządkiem magnetycznym [H4, H8]

Rodzina materiałów dwuwymiarowych (2D) obejmuje prawie wszystkie właściwości fizyczne, m.in. izolatory, metale materiały nadprzewodzące, a obecnie także struktury magnetyczne. Chociaż włożono wiele wysiłku w wyindukowanie magnetyzmu w cienkich warstwach, prawdziwie kryształy 2D wykazujące magnetyzm pochodzący od niezapełnionych powłok 3d metali przejściowych, odkryto dopiero w roku 2017 dla związków $Cr_2Ge_2Te_6$ [20] i CrI_3 [16]. Zostało to ujawnione przy pomocy skaningowej mikroskopii magnetoptycznej Kerra (z ang. scanning magneto-optic Kerr microscopy). Do niedawna uważano, że uporządkowanie magnetyczne nie może istnieć dla materiałów dwuwymiarowych w temperaturze wyższej od zera bezwzględnej, z powodu fluktuacji termicznych, które niszczą ten porządek [29]. Jednakże, ostatnie doniesienia wykazały, że anizotropia magnetyczna stabilizuje porządek magnetyczny, tłumiąc przy tym efekt fluktuacji termicznych [26]. Ponadto, wyniki teoretyczne, oparte na obliczeniach *ab initio*, wykazały istnienie stabilnych monowarstwów magnetycznych [37, 40]. Co więcej, pod koniec 2016 zaczęły pojawiać się doniesienia eksperymentalne, które wykazały uporządkowanie magnetyczne ujawnione przy pomocy spektroskopii Ramana [25].

Jednym z przedstawicieli magnetycznych materiałów warstwowych jest rodzina trichalkogenków metali przejściowych MPX_3 gdzie $M=V, Cr, Mn, Fe, Ni, Cu, Zn, X=S, Se, Te$ [40]. Materiały te wykazują wewnętrzne uporządkowanie antyferromagnetyczne w płaszczyźnie (AFM), zapewniając idealną platformę do badania niskowymiarowego magnetyzmu. Należy zauważyć, że materiały AFM są powszechnie spotykane w przyrodzie, jednakże są rzadziej wykorzystywane w przemyśle i zastosowaniach niż materiały wykazujące ferromagnetyzm. Jednym z wyzwania dla dwuwymiarowych kryształów AFM, jest to, w jaki sposób uporządkowanie AFM może być kontrolowane i odczytywane za pomocą konwencjonalnych technik magnetycznych. W szczególności, pomiary magnetyczne, takie jak SQUID lub metody rozpraszania neutronów, są niewystarczające ze względu na mały rozmiar próbki (2D). Jednak pomiary optyczne, takie jak spektroskopia Ramana i czy technika z generacji drugiej harmonicznej (ang. second-harmonic generation, SHG) [44], wskazują na pośrednie strategie badania magnetyzmu cienkich warstw. Z drugiej strony, badania teoretyczne właściwości fizycznych przy pomocy obliczeń *ab initio* mogą dać wgląd we właściwości fizyczne wrażliwe na porządek magnetyczny.

W pracy [H4] pokazujemy, że uporządkowanie magnetyczne silnie wpływa na właściwości elektronowe, transportowe i optyczne związku MnPS_3 . W szczególności, nasze wyniki ujawniają silny wpływ uporządkowania spinów na właściwości struktury pasmowej, takie jak położenie pasm, przecięcia pasm, krzywizna pasm czy wartości przerw pasmowych. Najmniejszą fundamentalną przerwę pasmową otrzymujemy dla konfiguracji AFM-stripy (1.8 eV dla DFT+U=3eV), a największą dla magnetycznego stanu podstawowego typu AFM-Néel (2.2 eV dla DFT+U=3eV). Dodatkowo, stan magnetyczny ma znaczący wpływ na krzywiznę pasm, a tym samym na masę efektywną nośników z krawędzi pasm, tj. dla najwyższej obsadzonego pasma walencyjnego i najniższej nieobsadzonego pasma przewodnictwa. W pracy pokazujemy, że masy efektywne silnie zależą od konfiguracji magnetycznej. W szczególności mniejsze masy efektywne uzyskuje się dla stanu FM niż odpowiadające im wielkości uzyskane dla konfiguracji AFM. W odniesieniu do różnych konfiguracji AFM, masy efektywne dla magnetycznego stanu podstawowego AFM-Néel są nawet o 40% większe niż wyznaczone dla układu spinów o porządku typu AFM-stripy. Dodatkowo, wykazujemy, że dziury są mniej mobilnymi nośnikami niż elektrony, niezależnie od uporządkowania magnetycznego. Co więcej, dla uporządkowania magnetycznego dla których superkomórka magnetyczna nie jest współmierna z komórką strukturalną, wykazującą symetrię heksagonalną, składowe tensora masy efektywnej w płaszczyźnie są anizotropowe.

W przypadku właściwości optycznych, w pracy [H4] pokazaliśmy, że energie wiązania ekscytonów z krawędzi pasm zależą od uporządkowania magnetycznego. W szczególności, w odniesieniu do różnych konfiguracji AFM, fundamentalne przejścia w strukturze pasmowej są optycznie dozwolone (niezerowa siła oscylatora) i wykazują liniową polaryzację światła. Co więcej, typ liniowej polaryzacji światła zależy od fazy AFM, a tym samym stanowi magnetyczny odcisk palca rodzaju uporządkowania AFM dla kryształów magnetycznych 2D.

W przeciwieństwie do opisanego powyżej uporządkowania magnetycznego w warstwie, w pracy [H8] zbadaliśmy wpływ pozapłaszczyznowego (ang. out-of plane) porządku magnetycznego na właściwości strukturalne, elektronowe i drgania sieci kryształu warstwowego CrSBr . W szczególności, ujawniliśmy, że pozapłaszczyznowe uporządkowanie magnetyczne silnie wpływa na strukturę elektronową na kierunku wysokiej symetrii $\Gamma - Z$ w przestrzeni odwrotnej, powodując rozszczepienie pasm przewodnictwa dla FM uporządkowania spinów w sąsiednich warstwach, podczas gdy dla fazy A-AFM pasma pozostają spinowo zdegenerowane. Dodatkowo, wraz ze zmianą fazy A-AFM na FM, charakter przerwy pasmowej ulega zmianie z prostej na pośrednią. Co więcej, w pracy [H8] zidentyfikowaliśmy optycznie aktywne mody Ramanowskie (B_{2g} i B_{3g}), które są wrażliwe na międzywarstwowe uporządkowanie magnetyczne. Innymi słowy, drgania sieci B_{2g} i B_{3g} stanowią niejako markery magnetyczne rodzaju pozapłaszczyznowego porządku magnetycznego. W szczególności, różnica częstotliwości modów B_{2g} i B_{3g} uzyskana teoretycznie dla fazy FM w porównaniu do fazy A-AFM, dobrze koreluje z odpowiadającymi wartościami eksperymentalnymi otrzymanymi z pomiarów Ramana.

Informacja o wykazywaniu się istotną aktywnością naukową realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej, w szczególności zagranicznej

Po ukończeniu studiów doktoranckich odbyłam dwuletni staż podoktorski w grupie teoretycznej prof. J. Majewskiego, gdzie badałam właściwości dwuwymiarowych materiałów na powierzchniach metalicznych. Od 2019 roku zaczęłam budować własną grupę badawczą, specjalizującą się w obliczeniach nanomateriałów metodami *ab initio*. W tym zakresie nawiązałam szeroką współpracę, zarówno z jednostkami krajowymi m. in. z Politechniką Warszawską (**PW**), Politechniką Wrocławską (**PWr**), czy z Instytutem Fizyki Polskiej Akademii Nauk **MagTop (IF PAN)**, a także z międzynarodowymi uniwersytetami tj. **Technion** (Izrael), Uniwersytetem z Regensburga **UR**(Niemcy), **RWTH** Uniwersytetem z Aachen (Niemcy), Uniwersytetem w Arkansas **UARK** (USA).

W szczególności od 2019 roku aktywnie współpracuję z eksperymentalną grupą badawczą prowadzoną przez Prof. A. Jastrzębską (PW). Nasze badania koncentrują się w obszarze materiałów warstwowych typu MXenes a także nowych dwuwymiarowych materiałów z rodziny MBenes. Od 2020r. kierujemy wspólnym projektem (OPUS, konsorcjum). Współpraca zaowocowała 8 publikacjami naukowymi, z czego 3 prace to publikacje przeglądowe *Adv. Materials* (IF=30), *Adv. Funct. Materials* (IF=19).

W zakresie właściwości optycznych i mechanicznych kryształów warstwowych intensywnie współpracuję z grupą eksperymentalną kierowaną przez prof. Roberta Kudrawca (PWr, rozpoczęta w 2020 r.). Nasza współpraca zaowocowała 3 wspólnymi publikacjami. Jestem regularnie zapraszana do wygłaszania wykładów seminaryjnych na Wydziale Podstawowych Problemów Techniki we Wrocławiu. Współpracujemy także aktywnie w ramach wymiany studenckiej, szkoląc studentów w ramach staży (Szymon Kałuża (staż), Miłosz Rybak). Obecnie jestem promotorem pomocniczym doktoranta p. Rybaka, a dr Tomasz Woźniak (PWr) od X. 2023r rozpoczął swój projekt SONATINA (NCN), który jest prowadzony na Wydziale Fizyki pod moim kierunkiem.

W zakresie właściwości opto-elektronicznych dot. magneśców 2D, aktywnie współpracuję z różnymi grupami eksperymentalnymi kierowanymi przez: Prof. Efrat Lifshitz (3 wspólne publikacje), **Technion, Israel**); Prof. Marcus Morgenstern (właściwości elektronowe, 1 praca związana z badaniami ARPES, **RWTH Aachen**), Prof. Jin Hu (1 publikacja, pomiary magnetyczne stopów, **UARK, USA**).

W ramach wszystkich wymienionych współprac z grupami eksperymentalnymi, grupa którą kieruję jest główną (lub jedyną) grupą teoretyczną, która wyjaśnienia obserwowalne zjawiska fizyczne.

W ramach współpracy teoretycznej, w obszarze z dziedziny opto-elektroniki i spintroniki współpracuję aktywnie z grupą Prof. J. Fabiana (**UR, Germany**, właściwości ekscytonowe materiałów warstwowych, 2 wspólne publikacje) i grupą Prof. Carmine Autieri (**MagTop, IF PAN**, efektywne hamiltoniany, 3 wspólne prace). Poniżej, zebrałam nowo rozpoczęte współprace naukowe a także zakończone.

Niedawno rozpoczęta współpraca naukowa: (naukowiec, instytut, wspólny temat badań):

- Dr. Oleksander Pylypovskyi, (**HZDR Germany**, wpływ magnetycznego oddziaływania dipolowego na właściwości kryształach magnetycznych 2D);
- Prof. Karol Szałowski (**University of Łódź (UŁ)**, fale gęstości ładunku w heterostrukturach na bazie kryształów 2D z rodziny MPX₃);
- Dr. Andrea Leon (**Pontifical University Catholic of Chile**, właściwości magnetyczne mieszanym kryształów magnetycznych 2D);
- Dr. Mateusz Wlazło (**Ensamble³ Center of Excellence (Warsaw)**, właściwości fononowe kryształu wartowego CrPS₄ badane metodami *ab initio*).

Współpraca zakończona (naukowiec, jednostka naukowa, współpraca w latach, liczba wspólnych publikacji):

- Dr. J. Kunstmann (TU Dresden, Germany, 2019-2021, 1 publikacja)
- Dr. S. Prucnal and Prof. Prof. Shenpianq Zhou (**HZDR Germany**, 2018-2021, 3 publikacje)
- Prof. P. Płochocka (**LNCMI Toulouse**, 2017-2018, 1 publikacja)

Poniżej inne (ważne) działania naukowe w okresie po uzyskaniu doktoratu 2017-2023:

Współpraca naukowa w ramach projektów badawczych

- 10.2023 -10.2025, projekt SONATINA prowadzony na Wydziale Fizyki UW, Kierownik projektu: Dr Tomasz Woźniak: (**PWr Wrocław**); agencja finansująca: Narodowe Centrum Nauki w Polsce (2023/48/C/ST3/00309),
- 07.2020 - 07.2024, OPUS 18, konsorcjum - współpraca dwóch jednostek badawczych **Wydział Inżynierii Materiałowej, Politechnika Warszawska (PW) i Wydział Fizyki (UW)**; agencja finansująca: Narodowe Centrum Nauki w Polsce (2019/35/B/ST5/02538), kierownik projektu PW: dr. inż. hab. A. M. Jastrzębska; Kierownik projektu z ramienia partnera:- dr. Magdalena Popielska (Birowska),
- 08.2017 - 02.2021, projekt SONATA 12, agencja finansująca: Narodowe Centrum Nauki w Polsce (UMO-2016/23/D/ST3/03446), PI: dr. Magdalena Popielska (Birowska), współpraca z międzynarodowymi grupami naukowymi: Prof. Shenpianq Zhou (**HZDR, Niemcy**), Prof. Paulina Płochocka (**LNCMI Tuluza, Francja**), Prof. Jaroslav Fabian (**UR, Niemcy**).
- 12.2014 – 09.2017, HARMONIA V, NCN (2013/10/M/ST3/00793) w ramach współpracy międzynarodowej z Prof. Claudia Draxl (**Humboldt University w Berlinie**). Kierownik projektu: Prof. dr hab. J. A. Majewski (Wydział Fizyki, UW); udział w projekcie jako badacz naukowy (*pozycja typu post-doc*) - dr M. Popielska.

Doświadczenie naukowe zdobyte za granicą:

Krótkie pobyty naukowe po doktoracie:

- **Marzec 2022** (1 tydzień), Uniwersytet W Regensburgu, Wydział Fizyki (Niemcy), grupa **Prof. Jaroslava Fabiana, Dr. Paulo E. Faria Junior**
- **Luty 2019 & Kwiecień 2019** (2 tygodnie), Technische Univeristat (TU) Dresden, Niemcy; grupa badawcza: **Prof. Thomas Heine, Dr. Jens Kunstmann**;
- **Kwiecień 2019**, Departments of the Institute of Ion Beam Physics and Materials Research, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Germany; **Prof. Shengqiang Zhou, Dr. S. Prucnal**;
- **Kwiecień 2019** (1 tydzień), Austria, Institute of Semiconductor & Solid State Physics, Johannes Kepler Universitat (JKU) Linz, Austria; grupa badawcza: **Prof. Alberta Bonanni**.

Informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę

Działalność dydaktyczna

Prowadziłam poniższe wykłady:

- (**Semestr letni 2022**) - (1100-4INZ21) 45h, “**Modeling of nanostructures and materials**” w języku angielskim, Wydział Fizyki, UW, dla studentów II stopnia studiów;
- (**Semestr zimowy: 2020, 2021, 2022**) - (1100-3INZ12) 30h, “**Modelowanie Nanostruktur**”, Wydział Fizyki, UW, obowiązkowy kurs dla studentów Inżynierii nanostruktur oraz studentów III-go roku Nanoinżynierii.

oraz ćwiczenia:

- (**Semestr letni 2021**) (1100-4INZ21) 45h, “**Modelling of nanostructures and materials**” w języku angielskim, Wydział Fizyki, UW, dla studentów II stopnia studiów;
- (**Semestr zimowy: 2019, 2020, 2021**) (1100-3INZ12) 45h, “**Modelowanie Nanostruktur**” w języku Python 3.0, Wydział Fizyki, UW.

- (Semestr zimowy: 2014) - (1100-3INZ12) 45h, „Modelowanie Nanostruktur” w języku Mathematica, Wydział Fizyki, UW.
- (Wrzesień 2013) - „START II - Mechanika Kwantowa” , dla studentów II stopnia, Wydział Fizyki, UW.
- (Semestr zimowy: 2010) - (1100-1INZ04) 30h, „Algebra z Geometrią”, dla studentów I stopnia, Wydział Fizyki, UW.
- (Semestr zimowy: 2010) (1100-2INZ13) 45h, „Programowanie i metody numeryczne”, w języku Fortran 90, Wydział Fizyki, UW.
- (Semestr letni 2010) (1100-1015) 45h, „Matematyka II”, dla studentów I stopnia, Wydział Fizyki, UW. Za prowadzenie tych zajęć otrzymałam **nagrodę Dziekana**.

Byłam promotorem **3 magistrantów** oraz **3 licencjatów**, oraz promotorem pomocniczym **3 doktorantów**. Lista prowadzonych studentów znajduje się poniżej:

Promotorstwo prac doktorskich:

- **3rd October 2022** - obrona pracy doktorskiej *Macieja M. Marchwianego*, Wydział Fizyki, UW, „*Opis własności nanostruktur niskowymiarowych za pomocą algorytmów uczenia maszynowego*”, (promotor pomocniczy).
- (studia doktoranckie w toku) *Miłosz Rybak* - studia doktoranckie rozpoczęte w X.2022r. na Wydziale Podstawowych Problemów Techniki, Politechniki Wrocławskiej, temat pracy: *Modelowanie kryształów magnetycznych typu vdW metodami ab initio*, (promotor pomocniczy).
- (studia doktoranckie w toku) *Varun G. Nair* - studia doktoranckie rozpoczęte w I.2021r. na Wydziale Inżynierii Materiałowej, Politechniki Warszawskiej, temat pracy: *Modelling of the MXenes and MBenes materials using density functional theory and machine learning approach*, (promotor pomocniczy).

Promotorstwo prac licencjackich i magisterskich:

- **27.02.2023** - praca licencjacka, *Marek Sokółowski*, Wydział Fizyki, UW, „*Badania stabilności nowych 2D stopów M_xB_{1-x} przy użyciu metod ab initio i uczenia maszynowego*”.
- **21.12.2022r.** - praca licencjacka, *Aleksandra Skolasińska*, Wydział Fizyki, UW, „*Badanie właściwości dielektrycznych nanomateriałów z rodziny MPX_3 przy użyciu metod ab initio.*”.
- **22.07.2022r** - praca magisterska, *Kamila Kotur*, Wydział Fizyki, UW, „*Tuning the magnetic properties upon non-magnetic substitution in MPX_3 ($M = Ni, Mn$; $X = S, Se$) systems*”.

- **12.07.2022r.** - praca magisterska, **Miłosz Rybak**, Wydział Podstawowych Problemów Techniki, Politechniki Wrocławskiej, “Badania ab initio dwuwymiarowych magnetyków z rodziny MPX_3 ”.
- **08.10.2020r.** - praca licencjacka, **Kamila Kotur**, Wydział Fizyki, UW, “Badania teoretyczne właściwości elektronowych warstwowej heterostruktury $NiPS_3/FePS_3$ ”
- **10th August 2020** - praca magisterska, **Tomasz Necio**, Wydział Fizyki, UW, “Badania ab initio właściwości strukturalnych, energetycznych i magnetycznych heterostruktury van der Waalsa $NiPS_3$ /grafen”.

Recenzje prac licencjackich i magisterskich:

- **wrzesień 2023** - praca licencjacka, **Marta Przybył**, *Koherentny transport ładunkowy i spinowy w lateralnych strukturach karbidków metali przejściowych - MXenes*,
- **wrzesień 2022** - praca magisterska, **Jan Kołodziejczyk**, *Stabilność, struktura elektronowa oraz własności termoelektryczne funkcjonalizowanych dwuwymiarowych azotków molibdenu (MXenes)*.
- **wrzesień 2020** - praca licencjacka, **Dominik Suwała**, *Symulacje rozszczepienia wywołanego oddziaływaniem spin-orbita w materiałach dwuwymiarowych grupy IV oraz ich pochodnych*.
- **wrzesień 2019** - praca licencjacka, **Adam Ćwilich**, “Modelowanie procesów tunelowania kwantowego w heterostrukturach azotkowych”;
- **maj 2017** - praca licencjacka, **Maciej Celuch**, “Modelowanie stanów powierzchniowych krystalicznych izolatorów topologicznych”;
- **grudzień 2019** - praca magisterska, **Przemysław Zieliński**, “Metoda ciasnego wiązania dla stanów elektronowych nieperiodycznych nanostruktur węglowych”;
- **wrzesień 2016** - praca magisterska, **Łukasz Gładczuk**, “Obliczenia struktury elektronowej dwuwymiarowych stopów pierwiastków IV grupy układu okresowego”;

Działalność organizacyjna

Brałam udział w posiedzeniach komisji wydziałowych w roli:

- sekretarza komisji, łącznie w 8 niezależnych komisjach ds. awansu na stanowisko profesora uczelni w latach 2021-2023;
- sekretarza dwóch niezależnych komisji dotyczących konkursu na stanowisko adiunkta badawczo-naukowego w latach 2022 i 2023;
- członek Rady Instytutu Fizyki Teoretycznej w latach 2020-2024;
- członek Rady Wydziału (RW) w poprzedniej kadencji RW.

Działalność popularyzatorska

Wygłosiłam wykład zaproszony dla prywatnej firmy **Astra Zeneca R&D Polska**, **14.07.2021r.**: *“Badania właściwości materiałów 2D przy użyciu metod uczenia maszynowego”*, M. Birowska. Prowadziłam **wykłady i ćwiczenia podczas szkoły letniej** zatytułowanej: *“Zastosowania zaawansowanych technik przetwarzania danych w naukach przyrodniczych – szkoła letnia w języku angielskim”* organizowanej przez Interdyscyplinarne Centrum Modelowania Matematycznego (ICM, UW) w dniach **28.06 - 09.07.2021**.

Wytwarzane oprogramowanie:

Supercell-core: A useful tool to generate an optimal supercell for vertically stacked nano-materials

AIP Advances 10, 105105 (2020)

Supercell-core download

Interfejs graficzny użytkownika oprogramowania Supercell-core: GUI

Inne informacje, ważne punktu widzenia, dotyczące jego/jej kariery zawodowej

Recenzje artykułów dla czasopism naukowych

W latach 2019-2023 zrecenzowałam 20 artykułów naukowych:

- **Nature Communications** (IF=17.7) → 1 recenzja w 2023.
- **Physical Review B** (IF=3.9) → 2 recenzje w 2023, 2 recenzje w 2021, 4 recenzje w 2020.
- **Applied Sciences** (IF=2.838) → 1 recenzja w 2020.
- **Journal of Physics: Condensed Matter** (IF=2.7) → 1 recenzja w 2020.
- **2D Materials** (IF=6.9) → 2 recenzje w 2019
- **Journal of Raman Spectroscopy** (IF=2.7) → 1 recenzja w 2019.
- **Journal of Physics D: Applied Physics** (IF=3.4) → 2 recenzje w 2020.
- **Physical Chemistry Chemical Physics** (IF=3.9) → 2 recenzje w 2019.

- **FlatChem** (IF=5.8) → 1 recenzje w 2023.
- **Materials** (IF=3.7) → 1 recenzje w 2019.

Budowanie zespołu badawczego

Członkowie kierowanego przeze mnie zespołu badawczego (stan: sierpień 2023r.):

- *Postdoc*: - **Dr Subrahmanyan Bandaru**, zatrudnienie w ramach projektu OPUS 18;
- 2 *doktorantów*: **Miłosz Rybak** (bierze udział w projekcie IDUBB), **Varun G. Nair** (bierze udział w projekcie OPUS 18).
- W ramach porozumienia pomiędzy spółką ENSEMBLE3 sp. z o. o. i UW, **Dr Mateusz Wlazło** realizuje zadania bawawcze na Wydziale Fizyki, w okresie 02.2023-12.2023, a także p. **Szymon Kałuża** (z PWr) odbywa miesięczne praktyki studenckie.
- Byli członkowie zespołu (*alumni*): **mgr Tomasz Necio** (2 lata, brał udział w projekcie SONATA jako wykonawca), **mgr Kamila Kotur** (3 lata, brała udział w projekcie SONATA jako wykonawca), **lic. Marek Sokołowski** (1 rok, brał udział w projekcie OPUS 18).

W ramach doszkalania zawodowego, brałam udział w kursie z kompetencji zawodowych pt. "Wyzwania lidarskie i przywództwa" w ramach Zintegrowanego Programu Rozwoju (ZIP) w dn. 14-15.09.2020.

Udział w międzynarodowych konferencjach członków zespołu badawczego

Poniżej, lista konferencji naukowych kierowanego przeze mnie zespołu badawczego w okresie 2018-2023. Kursywą podkreślono osobę prezentującą wyniki:

2023:

- ***E-MRS Fall Meeting 2023***, 18-21 wrzesień 2023, Warszawa, Polska: (**prezentacja ustna**): *Review on thermoelectric properties of MXene-based structures and other 2D materials*, **S. Bandaru**, A.M. Jastrzębska, M. Birowska;
- ***36th European Conference on Surface Science***, 28.08-01.09.2023, Łódź, Polska, (**prezentacja ustna**): *Band gap engineering of two-dimensional ScB MBene*, **S. Bandaru** M. Birowska, A. M. Jastrzębska;
- ***51th International School & Conference on the Physics of Semiconductors "Jaszowiec 2023"***, 17-23 czerwiec, Szczyrk, Poland; (**plakat**): *Tunable valley splitting in 2D MPX₃ crystals.*, **M. Rybak**, M. Birowska; (**plakat**): *Optical markers of magnetic phase transition in layered CrSBr*, **M. Rybak**, W. Linhart, M. Birowska, P. Scharoch, R. Kudrawiec;

2022:

- **50th International School & Conference on the Physics of Semiconductors “Jaszowiec 2022”**, 4-10 June, Szczyrk, Poland; (**plakat**): *Theoretical studies of the optical properties of MPX_3 ($X=S,Se$) -2D magnetic crystals*; **M. Rybak**, P. E. Faria Junior, T. Wozniak, P. Scharoch, and M. Birowska;
- **E-MRS Spring Meeting 2022**, 30 May - 3 June, Virtual Conference (**prezentacja ustna**): *Excellent excitonic properties and non-zero valley splitting in 2D antiferromagnetic MPX_3 crystals*; **M. Rybak**, P. E. Faria Junior, T. Wozniak, P. Scharoch, J. Fabian, J.Kunstmann and M. Birowska.

2021

- **49th International School & Conference on the Physics of Semiconductors “Jaszowiec 2021”**, 1-10 September: (**plakat**) *The influence of the magnetic ordering on the electronic properties of bilayer $NiPS_3$ – an ab initio study of vdW heterostructure*; **K. Kotur**, M. Birowska; (**plakat**): *Optical properties of transition metal trichalcogenides MPX_3 : a first principle study of 2D magnets*; **M. Rybak**, T. Woźniak, P. F. Junior, P. Scharoch, M. Birowska; (**plakat**): *Dielectric properties of transition metal trichalcogenides MPX_3* , A. Skolasińska, M. Birowska; (**plakat**): *Structural search and stability prediction of new M_xB_{1-x} phases based on ab initio calculations and Machine Learning Methods*, **M. Sokołowski**, M. Marchwiany, A. M. Jastrzębska and M. Birowska; (**plakat**): *Exploring Electronic Properties of Functionalized 2D MBenes -Graphene Like 2D Boron Sheets*, **V.G. Nair**, K. Kotur, A.M. Jastrzębska and M. Birowska.
- **Intermag 2021, 26-30 April 2021**, Virtual Conference (**prezentacja ustna**): *The Impact of the Intralayer and Interlayer Magnetism on the Electronic Properties of vdW Heterostructure $NiPS_3/FePS_3$ – a Theoretical Approach*, **K. Kotur** and M. Birowska.
- **33rd Workshop on Recent Developments in Electronic Structure (ES21)**, 12-15 July 2021; (**plakat**): *First-principles study of magnetic bilayer of $NiPS_3/FePS_3$* , **K. Kotur** and M. Birowska.
- **MiniModes 2021**, Chęciny, Polska, *Structural search and stability prediction of new M_xB_{1-x} phases based on ab initio calculations and Machine Learning Methods*, **M. Sokołowski**, M. Birowska.

2019:

- **E-MRS Fall Meeting 2019**, 16-19 September 2019, Warsaw, Poland: (**prezentacja ustna**): *Ab initio study of mixed manganese nickel phosphorus trichalcogenides- 2D layered materials*, **Aleksandra Jankowska** and M. Birowska; (**plakat**): *The impact of the different stacking configurations of the monolayer of $NiPS_3$ and graphene layer on the electronic properties of $NiPS_3$ structure*, **Tomasz Necio** and M. Birowska.

Stypendia naukowe & Nagrody:

- 2013 - *Stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego* za wybitne osiągnięcia w latach 2012/2013,
- 2013, 2012 Stypendia dla najlepszych doktorantów UW w latach 2011/2012; 2012/2013,
- Stypendium *Nowoczesny Uniwersytet* - stypendium współfinansowane przez Unię Europejską ze środków Europejskiego Funduszu Społecznego w ramach Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki, Warszawa,
- 03 lutego 2010, Nagroda Dziekana za prowadzenie zajęć dydaktycznych "Matematyka II" na UW,
- 2009 *Stypendia Mazowska* dla doktorantów

Literatura

- [1] "<https://github.com/tnecio/supercell-core>", 2020. the code can be also found under the link <https://www.fuw.edu.pl/~birowska>.
- [2] Carmine Autieri, Giuseppe Cuono, Canio Noce, Milosz Rybak, Kamila M. Kotur, Cliò Efthimia Agrapidis, Krzysztof Wohlfeld, and Magdalena Birowska. Limited ferromagnetic interactions in monolayers of MPS_3 ($M = \text{Mn}$ and Ni). *The Journal of Physical Chemistry C*, 126(15):6791–6802, Apr 2022.
- [3] Luca Banszerus, Michael Schmitz, Stephan Engels, Jan Dauber, Martin Oellers, Federica Haupt, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Bernd Beschoten, and Christoph Stampfer. Ultrahigh-mobility graphene devices from chemical vapor deposition on reusable copper. *Science Advances*, 1(6):e1500222, 2015.
- [4] Rabindra Basnet, Kamila M. Kotur, Milosz Rybak, Cory Stephenson, Samuel Bishop, Carmine Autieri, Magdalena Birowska, and Jin Hu. Controlling magnetic exchange and anisotropy by nonmagnetic ligand substitution in layered MPX_3 ($M = \text{Ni}, \text{mn}$; $X = \text{S}, \text{Se}$). *Phys. Rev. Res.*, 4:023256, Jun 2022.
- [5] Magdalena Birowska, Paulo E. Faria Junior, Jaroslav Fabian, and Jens Kunstmann. Large exciton binding energies in MnPS_3 as a case study of a van der Waals layered magnet. *Phys. Rev. B*, 103:L121108, Mar 2021.
- [6] Magdalena Birowska, Maciej E. Marchwiany, Claudia Draxl, and Jacek A. Majewski. Assessment of approaches for dispersive forces employing semihydrogenated graphene as a case study. *Computational Materials Science*, 186:109940, 2021.
- [7] Magdalena Birowska, Joanna Urban, Michał Baranowski, Duncan K Maude, Paulina Plochocka, and Nevill Gonzalez Szwacki. The impact of hexagonal boron nitride encapsulation on the structural and vibrational properties of few layer black phosphorus. *Nanotechnology*, 30(19):195201, feb 2019.
- [8] T Björkman, A Gulans, A V Krasheninnikov, and R M Nieminen. Are we van der waals ready? *Journal of Physics: Condensed Matter*, 24(42):424218, oct 2012.

-
- [9] Yuan Cao, Valla Fatemi, Ahmet Demir, Shiang Fang, Spencer L. Tomarken, Jason Y. Luo, Javier D. Sanchez-Yamagishi, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Efthimios Kaxiras, Ray C. Ashoori, and Pablo Jarillo-Herrero. Correlated insulator behaviour at half-filling in magic-angle graphene superlattices. *Nature*, 556(7699):80–84, Apr 2018.
- [10] Yuan Cao, Valla Fatemi, Shiang Fang, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Efthimios Kaxiras, and Pablo Jarillo-Herrero. Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices. *Nature*, 556(7699):43–50, March 2018.
- [11] Giulio Cocco, Emiliano Cadelano, and Luciano Colombo. Gap opening in graphene by shear strain. *Phys. Rev. B*, 81:241412, Jun 2010.
- [12] Dinh Loc Duong, Seung Mi Lee, Sang Hul Chae, Quang Huy Ta, Si Young Lee, Gang Hee Han, Jung Jun Bae, and Young Hee Lee. Band-gap engineering in chemically conjugated bilayer graphene: Ab initio calculations. *Phys. Rev. B*, 85:205413, May 2012.
- [13] R. P. Feynman. here’s plenty of room at the bottom. *Eng. Sci.*, 61:22–36, 1960.
- [14] I. V. Geim, A. K. and Grigorieva. Van der Waals heterostructures. *Nature*, 499(7459):419–425, Jul 2013.
- [15] P. Giannozzi and B. Stefano. Quantum espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(39):395502, 2009.
- [16] Cheng Gong, Lin Li, Zhenglu Li, Huiwen Ji, Alex Stern, Yang Xia, Ting Cao, Wei Bao, Chenzhe Wang, Yuan Wang, Z. Q. Qiu, R. J. Cava, Steven G. Louie, Jing Xia, and Xiang Zhang. Discovery of intrinsic ferromagnetism in two-dimensional van der waals crystals. *Nature*, 546(7657):265–269, 2017.
- [17] S. Grimme. Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction. *J. Comput. Chem.*, 27:1787 – 1799, 2006.
- [18] Burak Himmetoglu, Andrea Floris, Stefano de Gironcoli, and Matteo Cococcioni. Hubbard-corrected DFT energy functionals: The LDA+U description of correlated systems. *International Journal of Quantum Chemistry*, 114(1):14–49, 2014.
- [19] P. Hohenberg and W. Kohn. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.*, 136:B864–B871, Nov 1964.
- [20] Bevin Huang, Genevieve Clark, Efrén Navarro-Moratalla, Dahlia R. Klein, Ran Cheng, Kyle L. Seyler, Ding Zhong, Emma Schmidgall, Michael A. McGuire, David H. Cobden, Wang Yao, Di Xiao, Pablo Jarillo-Herrero, and Xiaodong Xu. Layer-dependent ferromagnetism in a van der Waals crystal down to the monolayer limit. *Nature*, 546(7657):270–273, 2017.

- [21] Benjamin G. Janesko, Thomas M. Henderson, and Gustavo E. Scuseria. Screened hybrid density functionals for solid-state chemistry and physics. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 11:443–454, 2009.
- [22] W. Kohn and L. J. Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.*, 140:A1133–A1138, Nov 1965.
- [23] G. Kresse and J. Hafner. Ab initio. *Phys. Rev. B*, 47:558–561, Jan 1993.
- [24] G. Kresse and J. Furth Müller. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Computational Materials Science*, 6(1):15 – 50, 1996.
- [25] Cheng-Tai Kuo, Michael Neumann, Karuppannan Balamurugan, Hyun Ju Park, So-onmin Kang, Hung Wei Shiu, Jin Hyoun Kang, Byung Hee Hong, Moon-sup Han, Tae Won Noh, and Je-Geun Park. Exfoliation and Raman Spectroscopic fingerprint of Few-layer NiPS₃ Van der Waals Crystals. *Scientific Reports*, 6(1):20904, Feb 2016.
- [26] J L Lado and J Fernández-Rossier. On the origin of magnetic anisotropy in two dimensional CrI₃. *2D Materials*, 4(3):035002, jun 2017.
- [27] Donghun Lee, Jea Jung Lee, Yoon Seok Kim, Yeon Ho Kim, Jong Chan Kim, Woong Huh, Jaeho Lee, Sungmin Park, Hu Young Jeong, Young Duck Kim, and Chul-Ho Lee. Remote modulation doping in van der Waals heterostructure transistors. *Nature Electronics*, 4(9):664–670, Sep 2021.
- [28] W. M. Linhart, M. Rybak, M. Birowska, P. Scharoch, K. Mosina, V. Mazanek, D. Kaczorowski, Z. Sofer, and R. Kudrawiec. Optical markers of magnetic phase transition in CrSBr. *J. Mater. Chem. C*, 11:8423–8430, 2023.
- [29] N. D. Mermin and H. Wagner. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic heisenberg models. *Phys. Rev. Lett.*, 17:1133–1136, Nov 1966.
- [30] Tomasz Necio and Magdalena Birowska. Supercell-core software: A useful tool to generate an optimal supercell for vertically stacked nanomaterials. *AIP Advances*, 10(10):105105, 10 2020.
- [31] M. L. Ng, R. Balog, L. Hornekær, A. B. Preobrajenski, N. A. Vinogradov, N. Märtensson, and K. Schulte. Controlling hydrogenation of graphene on transition metals. *The Journal of Physical Chemistry C*, 114(43):18559–18565, Nov 2010.
- [32] K. S. Novoselov, A. Mishchenko, A. Carvalho, and A. H. Castro Neto. 2D materials and van der Waals heterostructures. *Science*, 353(6298):aac9439, 2016.
- [33] K.S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T.J. Booth, V.V. Khotkevich, S.V. Morozov, and A.K. Geim. Two-dimensional atomic crystals. *Proc Natl Acad Sci*, 102:10451, 2005.

- [34] John P. Perdew, Kieron Burke, and Matthias Ernzerhof. Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.*, 77:3865–3868, Oct 1996.
- [35] Sekhar C. Ray, Navneet Soin, Thuto Makgato, C. H. Chuang, W. F. Pong, Susanta S. Roy, Sarit K. Ghosh, André M. Strydom, and J. A. McLaughlin. Graphene supported graphone/graphane bilayer nanostructure material for spintronics. *Scientific Reports*, 4(1):3862, Jan 2014.
- [36] Miłosz Rybak, Tomasz Woźniak, Magdalena Birowska, Filip Dybała, Alfredo Segura, Konrad J. Kapcia, Paweł Scharoch, and Robert Kudrawiec. Stress-Tuned Optical Transitions in Layered 1T-MX₂ (M=Hf, Zr, Sn; X=S, Se) Crystals. *Nanomaterials*, 12(19), 2022.
- [37] B. Sachs, T. O. Wehling, K. S. Novoselov, A. I. Lichtenstein, and M. I. Katsnelson. Ferromagnetic two-dimensional crystals: Single layers of K₂CuF₄. *Phys. Rev. B*, 88:201402, Nov 2013.
- [38] Frank Schwierz. Graphene transistors. *Nature Nanotechnology*, 5(7):487–496, Jul 2010.
- [39] D.S. Sholl and J.A. Steckel. *Density Functional Theory: A Practical Introduction*. Wiley, 2011.
- [40] Nikhil Sivadas, Matthew W. Daniels, Robert H. Swendsen, Satoshi Okamoto, and Di Xiao. Magnetic ground state of semiconducting transition-metal trichalcogenide monolayers. *Phys. Rev. B*, 91:235425, Jun 2015.
- [41] José M Soler, Emilio Artacho, Julian D Gale, Alberto García, Javier Junquera, Pablo Ordejón, and Daniel Sánchez-Portal. The SIESTA method for ab initio order-n materials simulation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 14(11):2745–2779, mar 2002.
- [42] Jangyup Son, Soogil Lee, Sang Jin Kim, Byung Cheol Park, Han-Koo Lee, Sanghoon Kim, Jae Hoon Kim, Byung Hee Hong, and Jongill Hong. Hydrogenated monolayer graphene with reversible and tunable wide band gap and its field-effect transistor. *Nature Communications*, 7(1):13261, Nov 2016.
- [43] Andrea Splendiani, Liang Sun, Yuanbo Zhang, Tianshu Li, Jonghwan Kim, Chi-Yung Chim, Giulia Galli, and Feng Wang. Emerging Photoluminescence in Monolayer MoS₂. *Nano Letters*, 10(4):1271–1275, Apr 2010.
- [44] Zeyuan Sun, Yangfan Yi, Tiancheng Song, Genevieve Clark, Bevin Huang, Yuwei Shan, Shuang Wu, Di Huang, Chunlei Gao, Zhanghai Chen, Michael McGuire, Ting Cao, Di Xiao, Wei-Tao Liu, Wang Yao, Xiaodong Xu, and Shiwei Wu. Giant non-reciprocal second-harmonic generation from antiferromagnetic bilayer CrI₃. *Nature*, 572(7770):497–501, Aug 2019.
- [45] S.E. Thompson, M. Armstrong, C. Auth, M. Alavi, M. Buehler, R. Chau, S. Cea, T. Ghani, G. Glass, T. Hoffman, C.-H. Jan, C. Kenyon, J. Klaus, K. Kuhn, Zhiyong

- Ma, B. McIntyre, K. Mistry, A. Murthy, B. Obradovic, R. Nagisetty, Phi Nguyen, S. Sivakumar, R. Shaheed, L. Shifren, B. Tufts, S. Tyagi, M. Bohr, and Y. El-Mansy. A 90-nm logic technology featuring strained-silicon. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 51(11):1790–1797, 2004.
- [46] Wei Zhao, Julian Gebhardt, Florian Späth, Karin Gotterbarm, Christoph Gleichweit, Hans-Peter Steinrück, Andreas Görling, and Christian Papp. Reversible hydrogenation of graphene on ni(111)—synthesis of “graphone”. *Chemistry – A European Journal*, 21(8):3347–3358, 2015.

Magdalena Popielska