

Kraków, 21.06.2017

Damian Wiśnios

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH

### **Streszczenie pracy doktorskiej pt. "Modelowanie adsorpcji w układach metal-tlenek"**

Tematem pracy doktorskiej była symulacja procesu formowania tlenku na powierzchni Fe(001) oraz zbadanie procesu tworzenia warstwy granicznej (interfejsu) pomiędzy tlenkiem i metalem. Proces ten może odbywać się na wiele sposobów i przebiegać w różnych warunkach, takich jak ultra wysoka próżnia lub atmosfera molekularnego tlenu, co ma to istotny wpływ na strukturę warstwy granicznej, która może znacząco wpływać na właściwości transportowe, czy magnetyczne układu. Do zbadania procesu formowania się warstwy tlenkowej zamodelowana została adsorpcja MgO oraz wzrost FeO, dla których podłożem była czysta powierzchnia Fe(001). Symulacje wykonane zostały przy pomocy programu VASP (Vienna *ab initio* simulation package), bazującym na teorii funkcjonału gęstości (DFT).

Model formowania się MgO został zrealizowany na dwa sposoby. Pierwszy polegał na adsorpcji cząsteczek MgO. W drugim modelu adsorbowane były pojedyncze atomy O i Mg, przy czym proces ten został przeprowadzony według dwóch różnych scenariuszy. Pierwszy scenariusz zakładał utlenienie powierzchni Fe(001), a następnie adsorpcję atomów Mg na podłożu O/Fe(001). W drugim, powierzchnia Fe(001) najpierw pokryta została magnezem, po czym struktura Mg/Fe(001) została utleniona. Wszystkie rozważane modele prowadzą do struktury MgO/Fe(001), w której atomy Mg znajdują się w położeniu międzywęzłowym, natomiast atomy O umiejscowione są nad atomami Fe. Wyniki obliczeń wskazują na formowanie się ostrego, nieutlenionego przejścia pomiędzy warstwami MgO i Fe, ale nie wykluczają także możliwości powstania utlenionego interfejsu przy odpowiedniej geometrii adsorpcji. W szczególności, adsorpcja atomów Mg pokazała, że magnez jest zdolny do redukcji utlenionej powierzchni żelaza. Dla wszystkich rozważanych modeli, przeanalizowane zostały zmiany strukturalne zachodzące podczas procesu adsorpcji, zmiany pracy wyjścia oraz redystrybucja ładunku elektronowego na powierzchni. Zbadana została struktura elektronowa oraz właściwości magnetyczne układu MgO/Fe(001), których zmiany zależą od zastosowanego modelu adsorpcji.

Z kolei model wzrostu FeO na powierzchni Fe(001) polegał na adsorpcji kolejnych warstw żelaza, a następnie ich utlenieniu. W rezultacie, otrzymana została stabilna, wielowarstwowa faza FeO. Obliczenia wykazały duży wpływ tlenu na strukturę elektronową i magnetyzm żelaza.