Názov výsledku: Superpočítačové modelovanie elektrónovej a spinovej štruktúry 2D materiálov
Anglicky názov výsledku:
Autori: Ján Brndiar, Marko Milivojević, Ivan Štich
Typ a číslo projektu: TREX CoE GA 952165, APVV-21-0272
Anotácia výsledku:
Výsledky sú prezentované v 4 publikáciách [1-4], ktoré spájajú dva spoločné menovatele: 1) výskum elektrónovej [1, 2] a spinovej [3, 4] štruktúry 2D materiálov a 2) superpočítačové modelovanie ako hlavný nástroj výskumu, konkrétne ultra presné mnohočasticové stochastické metódy kvantového Monte Carla [1, 2] a metódy teórie funkcionálu hustoty [3, 4]. Práce [1, 2] sa venujú vplyvu mechanických deformácií materiálu (monovrstva fosforénu a MoS2) na šírku zakázaného pásu. Výsledkom bola aj optimalizovaná atomárna štruktúra oboch materiálov, ktorá nie je experimentálne známa pre ideálne 2D materiály. Zistili sme, že vplyv deformácií na šírku zakázaného pásu fosforénu je kolosálny, a na MoS2 relatívne obmedzený a že fosforén je auxetický materiál. V [3, 4] sme študovali tzv. proximity efekt v 2D, ktorý umožňuje indukovať spinové vlastnosti do materiálu bez spinových vlastností (fosforén, grafén) z materiálu so silnými spinovými vlastnosťami (*WSe2, SnTe*).
Hlavné scientometrické výstupy:
[1] HUANG, Yongda - AHMAD, Faizan - MANZOOR, Mumtaz - BRNDIAR, Ján - MITAS, L. - FABIAN, Jaroslav - ŠTICH, Ivan. Colossal band gap response of single-layer phosphorene to strain predicted by quantum Monte Carlo. In Physical Review Research, 2023, vol. 5, no. 3, art. no. 033223. (2022: 4.2 - IF, 1.824 - SJR, Q1 - SJR). ISSN 2643-1564. Dostupné na: https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.5.033223 Typ: ADMA
[2] HUANG, Yongda - MANZOOR, Mumtaz - BRNDIAR, Ján - MILIVOJEVIĆ, Marko - ŠTICH, Ivan**. Straintronics with single-layer MoS2: A quantum Monte Carlo study. In Physical Review Research, 2024, vol. 6, no. 1, art. no. 013007. (2023: 3.5 - IF, Q1 - JCR, 1.689 - SJR, Q1 - SJR). ISSN 2643-1564. Dostupné na: https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.6.013007 (APVV-21-0272 : Štúdium elektrónových vlastností 2D materiálov ultra presnými metódami kvantového Monte Carla. VEGA č. 2/0070/21 : Nízko-dimenzionálne materiály- manipulácia, funkcionalizácia a bioaplikácie: LOW-D-MATTER) Typ: ADMA
[3] MILIVOJEVIĆ, Marko - GMITRA, Martin - KURPAS, Marcin - ŠTICH, Ivan - FABIAN, Jaroslav. Proximity-enabled control of spin-orbit coupling in phosphorene symmetrically and asymmetrically encapsulated by WSe2 monolayers. In Physical Review B, 2024, vol.109, no.7, art.no.075305. (2023: 3.2 - IF, Q2 - JCR, 1.345 - SJR, Q1 - SJR, karentované - CCC). (2024 - Current Contents, WOS, SCOPUS). ISSN 1550-235X. Dostupné na: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.109.075305 Typ: ADCA
[4] MILIVOJEVIĆ, Marko - GMITRA, Martin - KURPAS, Marcin - ŠTICH, Ivan - FABIAN, Jaroslav. Giant asymmetric proximity-induced spin-orbit coupling in twisted grapheneSnTe heterostructure. In 2D Materials, 2024, vol. 11 no.3, art.no. 035036. (2023: 4.5 - IF, Q2 - JCR, 1.483 - SJR, Q1 - SJR). ISSN 2053-1583. Dostupné na: https://doi.org/10.1088/2053-1583/ad59b4 Typ: ADCA