
Streszczenie

Niniejsza rozprawa doktorska pt. *Teoretyczne modelowanie materiałów magnetycznych na bazie metali przejściowych* ma postać cyklu czterech artykułów naukowych opublikowanych w recenzowanych czasopismach i obejmuje teoretyczną analizę materiałów magnetycznych. Zastosowane metody obliczeniowe pozwoliły wykonać badania właściwości strukturalnych, elektronowych i magnetycznych w heterostrukturach magnetycznych, ultracienkich warstwach ferromagnetycznych, antyferromagnetykach oraz magnesach trwałych, dostarczając wglądu w ich właściwości, modyfikacje oraz potencjalne zastosowania. Do badań wykorzystano teorię funkcjonału gęstości w implementacji metody pełnopotencjałowej z użyciem orbitali lokalnych (FPLO). Ponadto do symulacji eksperymentów z wykorzystaniem transmisyjnej mikroskopii elektronowej zastosowano metodę wieloprzekrojową (*multislice*), umożliwiając interpretację dyfraktogramów antyferromagnetycznego rozpraszania Bragga. Wyniki przedstawione w pierwszym artykule, dotyczącego badań właściwości magnetycznych w heterostrukturach na bazie przestrzennie centrowanego kubicznego (*bcc*) żelaza okrywającego atomową monowarstwę metali przejściowych, wykazały zgodność wyników z krzywą Slaterra-Paulinga. Obliczenia pokazały również, że monowarstwy Pt i W wykazują najsilniejszą prostopadłą anizotropię magnetyczną spośród wszystkich monowarstw *3d*, *4d* i *5d*. Wyniki drugiego badania, przeprowadzonego we współpracy z grupami eksperymentalnymi, pozwoliły zidentyfikować stan indukowany na granicy międzyfazowej Fe/MgAl₂O₄, prowadzący do przejścia fazowego w ultracienkich warstwach żelaza ze struktury przestrzennie centrowanej kubicznej, do struktury przestrzennie centrowanej tetragonalnej. Wyniki teoretyczne sugerują, iż optymalizacja podłoża może prowadzić do zwiększenia stabilności warstw żelaza oraz wzrostu energii anizotropii magnetokrystalicznej. W trzecim badaniu, analizując antyferromagnetyczne rozpraszanie Bragga w NiO i LaMnAsO, zastosowano metodę wieloprzekrojową (*multislice*) opartą na równaniu Pauliego w przybliżeniu przyosiowym (*paraxial*). Innowacyjne podejście obliczeniowe, uwzględniające efekty termiczne w układach magnetycznych, pozwoliło na pomyślnie odtworzenie obserwacji eksperymentalnych dla NiO w temperaturze pokojowej. Badanie uwydatniło znaczenie optymalizacji parametrów eksperymentalnych w celu wykrycia antyferromagnetycznego rozpraszania Bragga w materiałach składających się z cięższych pierwiastków, które zwiększają termiczne rozpraszanie dyfuzyjne. Czwarta praca skupiła się na optymalizacji właściwości magnetycznych w stopie CeFe₁₂ z metalami przejściowymi oraz atomami międzywęzłowymi. Wyniki ujawniły, że domieszkowanie takimi pierwiastkami jak Ti, Mn i W podnosi energię anizotropii magnetokrystalicznej, jednocześnie zmniejszając całkowity moment magnetyczny, co prowadzi do wartości twardości magnetycznej pozwalającej sklasyfikować te stopy jako magnetycznie twarde. Dalsze domieszkowanie atomami lekkimi, takimi jak B, C i N, dodatkowo poprawia twarde właściwości magnetyczne układów. Porównanie CeFe₁₂ z LaFe₁₂ ujawniło, że elektrony Ce 4*f* mają drugorzędny wpływ na wartość energii anizotropii magnetokrystalicznej.