

Abstrakt dizertační práce

Teorie spinově závislého transportu v magnetických pevných látkách

David Wagenknecht

Katedra fyziky kondenzovaných látek, Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova

2019

Teoretický a *ab initio* popis skutečného chování materiálů je náročný a často je zanedbávána kombinace různých rozptylových mechanismů nebo jevy související s teplotou. A to i přesto, že reálné experimentální vzorky obsahují nečistoty a nová elektronika musí fungovat při nenulových teplotách. Abychom se s tímto vypořádali, věnujeme se v dizertaci „alloy analogy“ modelu a jeho začlenění do plně relativistických výpočetních kódů založených na „tight-binding linear-muffin-tin orbital“ metodě s koherentní potenciálovou aproximací. Díky spolehlivosti a numerické efektivitě našeho přístupu z prvních principů s ním následně studujeme objemové pevné látky a jejich spintronické aplikace. Sjednocený popis fononů, magnonů a chemických příměsí vede na shodu s literaturou pro teplotně závislý elektrický transport (podélná vodivost a anomální Hallův jev) a rozptylové mechanismy jsou vysvětleny na základě elektronové struktury. Získané výsledky jsou využity pro identifikaci defektů v reálných vzorcích, navíc zkoumáme i obtížně měřitelné veličiny, například spinovou polarizaci elektrického proudu. Spočtená data pro nulové i konečné teploty dobře popisují nejen nemagnetické a magnetické tranzitivní kovy a náhodné binární slitiny, ale také feromagnetický „half-Heusler“ NiMnSb a antiferomagnetický CuMnAs. Výhody, omezení a numerické vlastnosti představených postupů diskutujeme se zaměřením na jejich budoucí použití pro ještě složitější materiály a pro účely základního výzkumu.