

Abstrakt:

V této disertační práci jsou prezentovány numerické výpočty magnetokrystalických anisotropií ve feromagnetických polovodičích a přechodových kovech se zaměřením na mikroskopický původ těchto relativistických jevů i na vývoj spintronických součástí s novou funkcionalitou.

Převážná část práce je věnována výzkumu magnetických anisotropií v (Ga,Mn)As epivrstvách a srovnání výpočtů s dostupnými experimentálními daty. Náš model popisuje valenční díry pomocí šestipásové obálkové funkce a jejich kinetickou výměnnou interakci s lokalizovanými manganovými momenty započítává v přiblížení středního pole. Nejprve studujeme otáčení magnetické snadné osy ze směru kolmého k vrstvě do směru paralelního v závislosti na koncentraci Mn iontů, koncentraci děr a teplotě v epivrstvách s elastickým napětím způsobeným různou mřížkovou konstantou substrátu a epivrstvy. Pak se zaměřujeme na vzájemnou velikost kubické a uniaxiální komponenty magnetické anisotropie v rovině vzorku. Do našeho efektivního Hamiltoniánu je vloženo uniaxiální napětí v rovině vzorku za účelem modelování anisotropií měřených v neupravených souvislých epivrstvách a zároveň je poskytnuto mikroskopické odůvodnění tohoto postupu. Model je pak rozšířen o uniaxiální napětí podle libovolného směru v rovině vzorku a používán pro popis experimentu, kde je směr magnetizace určen napětím indukovaným litografickou úpravou vzorku nebo piezo-elektrickým členem. Dále studujeme přepínání směru magnetizace v tranzistoru řízeném elektrickým polem. Vypočtené směry magnetické snadné osy a velikosti anisotropních polí se shodují semikvantitativně s experimentem na široké škále parametrů.

Druhá část práce staví na zkušenostech získaných při studiu magnetických anisotropií v (Ga,Mn)As a zkoumá analogické jevy s původem ve spin-orbitální interakci ve slitinách feromagnetických přechodových kovů. Náš popis těchto systémů je založen na přiblížení těsné vazby s realistickou Slaterovou-Kosterovou parametrizací. Vypočtené pásové struktury, hustoty stavů a magnetické anisotropní energie porovnáváme s dostupnými ab-initio výsledky pro jednoprvkové kovy a pro uspořádané slitiny CoPt a FePt. V případě bimetalických struktur pozorujeme kvalitativní shodu výsledků obou metod. Použitý formalismus a odpovídající nově vyvinutý kód umožňují modelování magnetických anisotropií v systémech se symetrií porušenou vrstevnatou strukturou slitiny, elastickým napětím mřížky nebo přiloženým elektrickým polem. Naše práce také poskytuje dobrý základ pro další výzkum relativistických transportních anisotropií ve formalismu lokálních Greenových funkcí, který je s přiblížením těsné vazby kompatibilní.