

Oponentský posudek doktorské dizertační práce

Autor: Mgr. Jan Zemen

Název: **Magnetic anisotropies in (Ga,Mn)As and metallic multilayers with strong spin-orbit coupling**

Předložená práce se zabývá teoretickým výzkumem magnetické anizotropie ve feromagnetickém polovodiči (Ga,Mn)As a v multivrstvách přechodových kovů CoPt a FePt. Tyto magnetické materiály jsou důležité pro současné technologické aplikace. Přesto zůstávají otevřené otázky stran některých jejich fyzikálních vlastností. Jsou to zejména otázky směru snadné osy magnetizace v závislosti na koncentraci iontů Mn, koncentraci děr a teplotě v epivrstvách s elastickým napětím způsobeným různou mřížkovou konstantou substrátu a magnetické epivrstvy. V práci jsou použity dvě hlavní metody ke studiu výše uvedených systémů. První je metoda popisu valenční díry pomocí šestipásové obáلكové funkce a jejich kinetickou výměnou interakci s lokalizovanými manganovými momenty, která je pojednána v přiblížení středního pole. Do efektivního hamiltoniánu je implementováno uniaxiální napětí v rovině vzorku aby bylo možno studovat anisotropie měřené v neuspořádaných souvislých epivrstvách. Druhou metodou je těsná vazba s realistickou parametrizací Slatera-Kostera. Výpočty elektronové struktury a z ní odvozených vlastností jsou konfrontovány s výsledky založenými na teorii funkcionálu hustoty (DFT). Tyto výpočty umožňují interpretovat experimentální výsledky a přispět k hlubšímu pochopení fyzikálních vlastností zkoumaných materiálů. Hlavním cílem práce bylo přispět k interpretaci experimentálních dat získaných pro feromagnetický polovodič (Ga,Mn)As a pro systémy obsahující tranzitivní kovy. Studie výše uvedených materiálů je živým a aktuálním tématem fyziky kondenzovaného stavu. Při tomto výzkumu autor aktivně zvládl teoretickou metodu virtuálního krystalu spojenou s k-p aproximací pro stavy děr a výpočet jejich výměnné interakce s magnetickými momenty Mn v přiblížení středního pole a metodu těsné vazby. S rozvojem nových experimentálních a teoretických metod jsou získávány kvalitativně i kvantitativně nové poznatky a to vede k dalšímu dynamickému vývoji fyzikálního modelu elektronových vlastností ve studovaných systémech, které jsou zajímavé z hlediska spintroniky.

Práce se skládá z následujících částí. Po obecném úvodu následuje dosti rozsáhlý dobře zpracovaný přehled současného stavu znalostí o feromagnetických polovodičích a kovových multivrstvách. V druhé kapitole se autor věnuje zavedení spin-orbitální interakce do modelového hamiltoniánu. Spin-orbitální interakce má zásadní význam pro vznik magnetokrytalové anizotropie v (Ga,Mn)As. Dále autor zavádí do teoretického popisu deformaci krystalové mříže pomocí tenzoru malých deformací. Tímto způsobem dochází k obecnější formě modelového hamiltoniánu. Rovněž se autor věnuje metodě těsné vazby a

diskutuje parametrizace Harrisona, ‘rozšířeného Harrisona’ a parametrizaci podle prací Mehla. Po zavedení spin-orbitální interakce autor diskutuje její význam ve srovnání s tvarovou anizotropií a ukazuje že spin-orbitální interakce dominuje v systémech zkoumaných v této práci.

V kapitole 3. autor nejprve poskytuje přehled nových teoretických výsledků pro (Ga,Mn)As, které získal ve své práci, a srovnání s experimentálními daty. Rovněž tato kapitola je podle mého názoru zpracována přehledně a výstižně. Ukazuje, že poloha snadné osy magnetizace citlivě závisí na hustotě děr a teplotě vzorku. Obecný trend, který je pozorovaný u většiny vzorků je v dobrém souhlasu s modelovými výpočty. Analýza experimentálních dat dovoluje detailní porovnání kubických složek anizotropie a dvou uniaxiálních složek. Naměřené a vypočtené anizotropní vlastnosti jsou srovnatelné ve většině vzorků. Teoretický popis je dále použit pro interpretaci experimentů, kde je směr magnetizace určen napětím indukovaným litografickou úpravou vzorku nebo piezo-elektrickým členem. Rovněž je studováno přepínání směru snadné magnetizace v tranzistoru řízeném elektrickým polem. Autor zde výrazně přispěl dalším vývojem již existujících programů, který umožnil zahrnout vliv jednoosé deformace krystalové mříže podél libovolného směru v rovině epivrstvy. Autor dále rozšířil fenomenologický popis (další členy ve funkciónálu volné energie, rovnice 3.4), aby bylo možné velké množství mikroskopických výsledků přehledně prezentovat. Hledání anizotropních koeficientů bylo programováno v MATLABU. Výhradu mám proti formální úpravě obrázků 3.9 až 3.12, 3.24, 3.25 a 3.28 až 3.33, kde by bylo na místě použití SI jednotek. V další části práce je zkoumána magnetokrystalová anizotropie ve slitinách feromagnetických přechodových kovů. Teoretický popis těchto systémů je založen na přiblížení těsné vazby s parametrizací Slatera-Kostera. Vypočtené pásové struktury, hustoty elektronových stavů a magnetokrystalová anizotropie je porovnána s dostupnými výpočty z prvních principů založených na teorii funkciónálu hustoty pro jednoduché kovy a sloučeniny CoPt a FePt. V těchto případech je pozorována kvalitativní shoda výsledků těchto zcela odlišných metod. Teoretický popis a odpovídající nově vyvinutý soubor programů dovoluje modelování magnetické anizotropie v systémech se symetrií narušenou vrstevnatou strukturou slitiny, elastickým napětím nebo přiloženým elektrickým polem. Je položen solidní základ pro studium relativistických efektů v transportních vlastnostech založený na formalismu lokálních Greenových funkcí v rámci přiblížení těsné vazby.

Následuje závěrečné shrnutí hlavních výsledků, tři dodatky a přehled použité literatury (158 citací). Tyto a výše uvedené části práce jsou vnitřně konzistentní a představují nesporný příspěvek k pochopení mikroskopické podstaty mechanismů, které vedou k řadě zajímavých a v některých případech i anomálních jevů ve studovaných systémech.

K panu Mgr. Zemenovi mám následující dotazy či náměty.

- 1.) Testoval jste vliv spin-orbitální interakce spojený s energetickým rozštěpením Slaterových-Kosterových parametrů na Vámi získané numerické výsledky (paragraf 2.2.4, strana 32)?
- 2.) Dopování krystalu GaAs atomy Mn znamená, že systém (Ga,Mn)As je neuspořádaný. Tento jev se projeví na výsledné elektronové struktuře. Není tato změna elektronové struktury zásadnější než vliv spin-orbitální interakce?
- 3.) Vámi vypočtená magnetokrystalová anizotropie jako funkce hustoty děr se dosti liší od výsledků v práci [110]. Viz strana 47, obrázek 3.8. Můžete detailně diskutovat příčinu tohoto nesouhlasu?
- 4.) Jakou formu výměnného-korelačního potenciálu (LDA, GGA) jste použil pro výpočty z prvních principů v rámci teorie funkcionálu hustoty (metoda APW+lo, program WIEN2k) v paragrafu 3.3.1?

Práce je napsána přehledným a logickým způsobem, a na vysoké technické úrovni (úprava odstavců, barevné obrázky zakomponované přímo v textu), která je z časového hlediska náročná. Existenci několika stylistických chyb, které jsem v práci našel (str. 21 demonstrated, str. 71 dvakrát functions), lze proto omluvit snahou o vysokou celkovou technickou úroveň dizertační práce.

Hlavní výsledky dizertační práce byly publikovány v samostatných publikacích ve významných mezinárodních časopisech (Acta physica polonica, Phys. Rev. B, Phys. Rev. Lett.). Výše uvedené skutečnosti ukazují, že pan Mgr. Zemen prokázal v době svého působení na MFF UK a FZU svou vysokou vědeckou úroveň v mezinárodním měřítku. Práce svou náplní a kvalitou splňuje požadavky kladené na doktorandskou práci na MFF UK a prokazuje předpoklady autora k samostatné tvořivé práci. Doporučuji proto práci k obhajobě a věřím, že po její úspěšné obhajobě bude autorovi udělena vědecká hodnost doktor (PhD).

Ve Praze dne 15.10.2010

Doc. RNDr. Martin Diviš, CSc.
Matematicko-fyzikální fakulta UK
Ke Karlovu 5, 121 16 Praha 2