

Název práce: Relativistická teorie elektronového transportu v magnetických vrstvách

Autor: Rudolf Sýkora

Katedra / Ústav: Ústav teoretické fyziky

Vedoucí doktorské práce: doc. RNDr. Ilja Turek, DrSc.,

Katedra fyziky kondenzovaných látek

Abstrakt: V práci jsou rozebrány detaily teorie funkcionálu hustoty s využitím pohledu Levyho a Lieba. Jsou odvozeny Kohnovy–Shamovy rovnice, nejprve pro nejjednodušší nerelativistický bezspinový případ, pak s přihlédnutím k existenci spinu a možnému spinovému magnetizmu, a nakonec jsou odvozeny plně relativistické Kohnovy–Shamovy–Diracovy rovnice. Diskutována je lineární muffin-tinová (LMTO) metoda výpočtu elektronové struktury se zmíněním nutných změn pro možnost započtení efektů spin-orbitální (SO) interakce do jinak skalárně relativistické (SR) teorie. Je odvozen vztah pro výpočet vodivosti vrstevnatého systému s využitím Landauerova rozptylového pohledu a s použitím jednoduchých nerovnovážných Greenových funkcí. Vybudovaný formalismus je následně použit ke studiu vrstevnatých kovových systémů složených z lehkých prvků Co, Ni, Cu a vrstevnatých systémů obsahujících tunelovací bariéru, Fe/MgO/Ag a Fe/GaAs/Ag. Pro tyto systémy jsou diskutovány efekty spin-orbitální interakce ve vztahu k tzv. GMR poměru a/nebo velikosti tunelovací anisotropní magnetoresistance (TAMR). Jsou ukázány jednak systémy, ve kterých jsou tyto efekty malé, rovněž však i systémy, ve kterých je SO interakce významná.

Klíčová slova: Teorie funkcionálu hustoty, Kvantový transport, Magnetické multivrstvy, Tunelovací anisotropní magnetoresistance, Spin–orbitální interakce