

Streszczenie

Zakres niniejszej pracy obejmuje badania *ab initio* jednoosiowej magnetycznej anizotropii na przykładzie rozcieńczonego półprzewodnika półmagnetycznego jakim jest (Ga,Mn)As. (Ga,Mn)As jest obiektem intensywnych badań ostatniej dekady. Silne oddziaływanie spin-orbita w tym materiale wpływa znacząco na jego własności magnetyczne i elektryczne oraz prowadzi do zjawisk, które dają ogromne możliwości aplikacyjne w szybko rozwijającej się nowej dziedzinie nauki jaką jest Spintronika. Jednym z szeroko badanych i intrygujących zjawisk występujących w rozcieńczonych półprzewodnikach półmagnetycznych, wykazujących strukturę blendy cynkowej, jest występowanie jednoosiowej magnetycznej anizotropii nieoczekiwanej dla tego rodzaju układów. Wcześniejsze próby zrozumienia mechanizmu tego zjawiska nie dawały jego zadowalającego wyjaśnienia. Badania zostały przeprowadzone przy użyciu teorii funkcjonału gęstości (ang. density functional theory, DFT), w ramach dwóch podejść: L(S)DA oraz L(S)DA+U. DFT jest obecnie najpotężniejszym i najlepszym narzędziem opartym o metody mechaniki kwantowej, pozwalającym zrozumieć zjawiska zachodzące w rzeczywistych materiałach. Praca została podzielona na dwie główne części poświęcone oddziaływaniom magnetycznym jonów Mn na: (i) powierzchni (Ga,As) oraz (ii) w objętościowym kryształ (Ga,Mn)As, istotnym z punktu widzenia wyjaśnienia fizycznego mechanizmu jednoosiowej magnetycznej anizotropii w (Ga,Mn)As, jak i jego ilościowego opisu. W pierwszej części pracy zostały zbadane strukturalne, elektroniczne i magnetyczne własności izolowanych par manganów na idealnej (1×1) jak również zrekonstruowanych, (2×1) , $\beta(2 \times 4)$, and $\beta 2(2 \times 4)$, powierzchniach (001) GaAs zakończonych warstwą atomów arsenu. Pokrycie powierzchni parami manganów odpowiadało $1/8$ powierzchni warstwy. We wszystkich badanych przypadkach otrzymano niejednorodny rozkład jonów manganowych na

powierzchniach warstwy. Daje to podstawy do stwierdzenia, że ten niejednorodny rozkład jonów Mn propagując się do wnętrza objętościowej warstwy $(Ga,Mn)As$ będzie prowadził do obniżenia kubicznej symetrii kryształu, a w konsekwencji do pojawienia się jednoosiowej magnetycznej anizotropii w płaszczyźnie i poza płaszczyzną warstwy. Drugą część pracy stanowi ilościowy opis badanego zjawiska anizotropii, dla koncentracji par manganowych równej 6.25 %. Otrzymane wyniki dają o rząd wielkości większe stałe jednoosiowej magnetycznej anizotropii niż raportowane wielkości stałych z eksperymentu. Analiza eksperymentalnych warunków pomiarowych wskazuje na konieczność uwzględniania innych istotnych, aczkolwiek niezmiernie złożonych z teoretycznego punktu widzenia, czynników w celu poprawienia zgodności teorii z eksperymentem. W szczególności, jest wielce prawdopodobne, że założona asymetria w rozkładzie dimerów Mn w $(Ga,Mn)As$ nie jest kompletna. Z drugiej strony sugeruje to możliwość kontrolowania magnetycznej anizotropii w procesie wzrostu, zmieniając takie warunki wzrostu jak temperaturę czy jego szybkość. W pracy został także przebadany wpływ zewnętrznych naprężeń na stałe jednoosiowej magnetycznej anizotropii, jako jeden z możliwych sposobów na modyfikację anizotropii magnetycznej. Ogólne trendy tych zależności są zgodne z wynikami doświadczalnymi. Głównym osiągnięciem pracy jest podanie po raz pierwszy, wiarygodnego mikroskopowego mechanizmu prowadzącego do makroskopowego zjawiska anizotropii magnetycznej w $(Ga,Mn)As$.