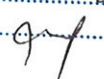


Dziekanat Wydziału Fizyki UW
Seksja ds. pracowniczych
Wpłynęło dn. 27.10.2014
podpis 

Warszawa, 27 października 2014

prof. dr hab. Krzysztof Byczuk
Instytut Fizyki Teoretycznej
Wydział Fizyki
Uniwersytet Warszawski
ul. Pasteura 5
02-093
Warszawa

Pani Dziekan
prof. dr hab. Teresa Rząca-Urban
Wydział Fizyki
Uniwersytet Warszawski
w/m

Recenzja rozprawy doktorskiej pani mgr Magdaleny Popielskiej

Rozprawa doktorska pani mgr Magdaleny Popielskiej zatytułowana jest "Uniaxial magnetic anisotropy in diluted magnetic semiconductors (Ga,Mn)As". Zawiera 153 stron tekstu podzielonego na siedem rozdziałów, dwa uzupełnienia, spis osiągnięć autorki oraz spis literatury. Dziesięć stron poprzedzających tekst główny to spis treści, spis rysunków, streszczenie i podziękowania. Praca doktorska napisana jest w języku angielskim. Praca została wykonana pod opieką naukową prof. dr hab. Jacka Majewskiego w Instytucie Fizyki Teoretycznej, Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego. Pani Popielska jest współautorką 9 publikacji naukowych, wyniki swoich badań prezentowała na 8 konferencjach międzynarodowych jako doniesienia ustne i na 9 konferencjach jako prezentacje w formie plakatu.

Rozdział pierwszy "Introduction" poświęcony jest krótkiemu wprowadzeniu do zagadnienia spintroniki - historii oraz znaczenia we współczesnej nauce i elektronice. W dalszej części tego rozdziału autorka zarysowuje plan rozprawy doktorskiej i główne cele pracy.

W rozdziale drugim zatytułowanym "Basic theoretical background" przedstawione są metody obliczeniowe stosowane w badaniach w tej rozprawie. Autorka opisuje podstawy teorii funkcjonału gęstości i jej relatywistyczne uogólnienie, zagadnienie

wyboru bazy funkcji, w której problem jest rozwiązywany, metodę pseudopotencjału. Pod koniec pani mgr. Popielska opisuje zagadnienie niekolinearnego magnetyzmu i metody jego badania. Rozdział ten zamyka dyskusja metody LDA+U, czyli przybliżenia lokalnej gęstości do funkcjonału gęstości oraz wyjście poza to przybliżenie poprzez uwzględnienie lokalnej energii oddziaływania U, tzw. wyraz Hubbarda. W rozważaniach uwzględnia możliwość spinowej polaryzacji.

Rozdział trzeci "(Ga,Mn)As material" opisuje główne własności arsenku galu domieszkowanego manganem. Jest to kanoniczny układ z klasy rozcieńczonych półprzewodników magnetycznych. Autorka omawia przypuszczalne mechanizmy prowadzące do magnetyzmu (uporządkowania ferromagnetycznego) w tych materiałach. W dalszej części koncentruje się na anizotropii magnetycznej w tych układach. Szczegółowo opisuje rodzaje anizotropii obserwowane w doświadczeniach. Rozdział ten zamyka dyskusja oddziaływania spin-orbita jako źródła anizotropii w polaryzacji spinowej poprzez sprzężenie z siecią krystalograficzną.

Wyniki pracy doktorskiej, stanowiące jej zasadnicze tezy, prezentowane są w rozdziale czwartym i piątym. Rozdział czwarty "Surface calculations" poświęcony jest anizotropii powierzchniowej i obliczeniom służącym wyjaśnieniu struktury powierzchni (GaMn)As. Początkowo autorka opisuje obecną wiedzę na temat rekonstrukcji powierzchni (GaMn)As z teoretyczno-obliczeniowego punktu widzenia i z punktu widzenia wyników doświadczalnych. Dalej mgr Popielska przedstawia podstawowe wzory z termodynamiki, które w połączeniu z rachunkami w ramach teorii funkcjonału gęstości pozwalają na określenie stabilności danej rekonstrukcji powierzchni. Metody obliczeniowe i modele powierzchni są prezentowane w dalszej części. Podrozdział czwarty zawiera długie i szczegółowe przedstawienie wyników obliczeń dla różnych konfiguracji Mn i As na powierzchni półprzewodnika. Przedstawione są różne warianty rekonstrukcji powierzchni oraz magnetyczne własności powierzchni. Na bazie tych wyników w kolejnym podrozdziale autorka wyciąga wnioski na temat fizyki magnetyzmu na powierzchni (GaMn)As. Do najważniejszych wyników tej części rozprawy należy zaliczyć stwierdzenie, że energia układu silnie zależy od położenia, orientacji i odległości pomiędzy atomami manganu w parach manganowych podstawianych w podsieci galowej na powierzchni (001) półprzewodnika GaAs odbudowanych na różne sposoby. Najbardziej energetycznie stabilna konfiguracja jest wtedy gdy atomy manganu tworzą dimery będąc względem siebie w pozycjach najbliższych sąsiadów. Ta obserwacja nie zależy od sposobu rekonstrukcji powierzchni, w ramach rekonstrukcji studiowanych w tej rozprawie. Autorka pokazała, że istnieją jedynie dwie nierównoważne orientacje krystalograficzne dimerów Mn, tj. [110] i [1-10]. Mają one różną energię całkowitą. W przypadkach (2x1) i beta(2x4) rekonstrukcji dimery Mn ustawiają się wzdłuż kierunku [110]. Dla rekonstrukcji (1x1) i beta2(2x4) kierunek [1-10] jest bardziej stabilny dla ustawiania się dimerów Mn. Pokazano także, że kierunek ustawienia się dimerów ma

wpływ na rodzaj mechanizmu prowadzącego do magnetyzmu. Dimery w kierunku [110] wykazują uporządkowanie ferromagnetyczne spinów, który można wyjaśnić w ramach hipotezy dziuowego przenoszenia ferromagnetycznego oddziaływania. Ustawienie dimerów Mn w kierunku [1-10] preferuje uporządkowanie antyferromagnetyczne spinów, co jest zgodne z regułą Goodenough'a-Kanamori-Andersona.

Rozdział piąty rozprawy doktorskiej przedstawia obliczenia dotyczące anizotropii magnetycznej w objętościowym półprzewodniku (GaMn)As. Rozdział ten otwiera przegląd obecnego stanu wiedzy teoretycznej i doświadczalnej na ten temat. Następnie omawiane są mechanizmy prowadzące do łamania kubicznej symetrii kryształu. Dalsze rozdziały wprowadzają stałe anizotropii w funkcjonale Landaua dla magnetyzacji korzystając z reguł symetrii oraz przedstawiona jest metoda samozgodnego wyznaczania energii anizotropii. W końcowej części energia magnetyczna anizotropii jest zaprezentowana oraz rozważania na temat zmiany magnetycznej anizotropii poprzez mechaniczne naprężenia w układzie. Rozdział ten zamykają konkluzje i porównanie teorii z doświadczeniem. Do najważniejszych wyników tego rozdziału należą: wybiórcze ułożenie atomów manganu, tj. dimerów Mn, na powierzchni decyduje o łamaniu symetrii w układzie objętościowym, magnetycznych anizotropiach w płaszczyźnie i poza płaszczyznami. Pozwala to wnioskować, że proces wzrostu epitaksalnego jest decydujący na własności (GaMn)As i kryształ w pewien sposób "pamięta" swoją historię wzrostu. Okazuje się także, że wielkość anizotropii magnetycznej przewidywanej teoretycznie jest o rząd wielkości większa niż faktycznie obserwowana w eksperymentach. Sugeruje to, że obsadzanie preferowanych pozycji przez dimery Mn jest częściowe po procesie całkowitego wzrostu. Dalej autorka wnioskuje, że zmiana warunków wzrostu może być użyta jako metoda zmiany kierunku łatwej osi namagnesowania. Zauważa także, że zmniejszanie grubości próbki (film) powoduje, że anizotropia powierzchniowa i warstwowa staje się dominująca, nawet przy przypadkowym rozmieszczeniu jonów manganu. Obliczenia pokazują także, że nie jest możliwa zasadnicza modyfikacja anizotropii magnetycznej poprzez ciśnienie hydrostatyczne w zakresach osiągniętych eksperymentalnie.

Rozprawę zamykają podsumowania i omówienie nierozwiązanych problemów na przyszłość. Wydaje się, że możliwości obliczeniowe dostępne w zespole prof. J. Majewskiego pozwolą niebawem na ich rozwiązanie. Spis literatury zawiera rekordową liczbę 225 prac.

Rozprawa zawiera wiele mocnych stron. Jest napisana bardzo szczegółowo, rzetelnie i może stanowić źródło informacji dla badaczy podobnych problemów. Metody stosowane przez autorkę należą do dobrze ugruntowanych, kody programów są w powszechnym użyciu i zostały wielokrotnie przetestowane. Wszystkie podjęte badania były silnie motywowane sytuacją doświadczalną. Autorka cały czas

porównuje swoje wyniki z eksperymentem lub wyciąga wnioski natury eksperymentalnej. Strona redakcyjna pracy jest bardzo dobra, praca zawiera prezentację wyników w postaci wykresów, diagramów, tabel, oraz przestrzennych wizualizacji badanych struktur. Bardzo dobrym pomysłem było umieszczenie cytowanych prac w dwóch kolumnach oraz podanie stron, gdzie dana praca jest cytowana. Najważniejszym jednak jest fakt, że otrzymane wyniki są nowatorskie, ważne dla tematyki i pomocne dla środowiska fizyków badających (GaMn)As.

Do słabych stron muszę zaliczyć zupełny brak spójności w sposobie wprowadzania i używania skrótów na oznaczanie długich angielskich nazw. Liczba skrótów jest ogromna, np. na pierwszych trzech stronach wstępu czytelnik jest bombardowany 12 nowymi oznaczeniami na specyficzne nazwy angielskie. W innych miejscach skróty pojawiają się wcześniej niż ich definicja podana kilka stron później, lub są wprowadzane wiele razy. Brakuje też indeksu skrótów. Z naukowego punktu widzenia brakuje mi dyskusji i porównania wyników z zastosowaniem różnych schematów wprowadzania tzw. poprawki od podwójnego liczenia energii (double counting corrections) w metodzie LDA+U. Jak wiemy z badań w ramach LDA połączonych z teorią dynamicznego pola średniego sposób korekcji podwójnego liczenia energii nie jest jednoznaczny i różne schematy mogą prowadzić do fizycznie różnych wyników.

Podsumowując, praca zawiera nowe wyniki naukowe, częściowo opublikowane w pracy w Physical Review Letters oraz w pracy konferencyjnej, i spełnia wszystkie formalne i zwyczajowe wymagania potrzebne do otrzymania tytułu naukowego doktora nauk fizycznych. Dlatego wnioskuję o nadanie Pani mgr Magdalenie Popielskiej tytułu doktora.

Z poważaniem



Krzysztof Byczuk