

Dr hab. Andrzej Łusakowski
prof. nzw. IF PAN
Instytut Fizyki PAN
Al. Lotników 32/46
02-668 Warszawa

Recenzja pracy doktorskiej mgr Magdaleny Popielskiej "Uniaxial Magnetic Anisotropy in Diluted Magnetic Semiconductor (Ga,Mn)As".

Recenzowana praca doktorska została wykonana w Instytucie Fizyki Teoretycznej Uniwersytetu Warszawskiego pod kierunkiem prof. dr hab. Jacka Majewskiego. Poświęcona jest ona problemowi anizotropii jednoosiowej występującej w (GaMn)As, a w szczególności przyczynom pojawiania się tej anizotropii.

Problem anizotropii magnetycznej jest niezwykle ważny zarówno z punktu widzenia badań podstawowych jak i kreacji i zastosowań w praktyce nowych materiałów elektronicznych. Dlatego podjęcie tej tematyki przez mgr Magdalenę Popielską uważam za głęboko uzasadnione.

Praca składa się z siedmiu rozdziałów.

Rozdział 1 to krótki wstęp do spintroniki, intensywnie rozwijanej od kilkunastu lat dziedziny fizyki ciała stałego. Przedstawiony jest również plan dalszej części pracy doktorskiej.

Wyniki przedstawione w pracy otrzymane zostały przy pomocy metod ab initio. Dlatego, w Rozdziale 2 Autorka omawia metodę funkcjonału gęstości, poczynając od podstawowych idei, a kończąc na uogólnieniach relatywistycznych. Omówione są pseudopotencjały, zarówno nierelatywistyczne jak i ich uogólnienia uwzględniające oddziaływanie spin – orbita. Przedstawione są również podstawy niekolinearnego magnetyzmu i podejścia LDA+U. Rozdział 2 oczywiście nie jest kompletnym podręcznikiem metody funkcjonału gęstości, natomiast zawiera bardzo rozwinięty zbiór odnośników literaturowych i może być z całą pewnością polecony jako krótki przewodnik po tej metodzie.

Wszystkie obliczenia przedstawione w pracy zostały wykonane dla konkretnego materiału, a mianowicie dla arsenku galu z manganem, (GaMn)As. W Rozdziale 3 Autorka rozpoczynając od podstawowych informacji na temat czystego GaAs, struktury krystalicznej, symetrii czy konfiguracji elektronowych atomów tworzących kryształ omawia następnie znane z literatury modele jonu manganu w GaAs. To co jest moim zdaniem niezwykle ważne w tym Rozdziale, to zwrócenie uwagi na znane z eksperymentu silne relacje pomiędzy własnościami konkretnego kryształu a procesem technologicznym, który doprowadził do jego powstania. Autorka omawia również pochodzenie magnetyzmu, w szczególności krótko przedstawia podejście oparte na modelu Zenera, będące obecnie podstawowym opisem własności

magnetycznych półprzewodników półmagnetycznych. W Rozdziale 3 Autorka pracy przedstawia również zasadniczy problem, który doprowadził do podjęcia tematyki rozprawy, a mianowicie problem istnienia anizotropii magnetycznej w płaszczyźnie (001). Nierównoważność, ze względu na własności magnetyczne, kierunków [110] i $[\bar{1}10]$ została potwierdzona w wielu eksperymentach, natomiast z teorii symetrii jednoznacznie wynika, że taka nierównoważność nie powinna być obserwowana.

W 2012 roku w Physical Review Letters ukazała się praca, w której mgr Magdalena Popielska jest pierwszym autorem. W pracy tej została przedstawiona koncepcja, zgodnie z którą przyczyną nierównoważności kierunków [110] i $[\bar{1}10]$ jest nieprzypadkowy rozkład jonów manganu w sieci krystalicznej. W trakcie procesu wzrostu na powierzchni kryształu położenie dimeru złożonego z dwóch jonów manganu będących najbliższymi sąsiadami w kierunku $[\bar{1}10]$ jest z energetycznego punktu widzenia daleko bardziej korzystne niż ich ułożenie w kierunku [110]. Dlatego liczba dimerów w ułożonych kierunku $[\bar{1}10]$ jest większa niż w kierunku [110] co prowadzi do anizotropii magnetycznej w płaszczyźnie (001). Tak jak rozumiem, zasadniczym wkładem mgr Magdaleny Popielskiej w wyżej wymienioną pracę było uzasadnienie tego pomysłu przy pomocy obliczeń z pierwszych zasad.

Przedstawione we wspomnianym artykule wyniki stanowią jedynie niewielką część Rozdziału 4. W rozdziale tym uwzględnione zostały rekonstrukcje powierzchni w trakcie wzrostu i dla każdego przypadku została przeprowadzona szczegółowa analiza zależności energetycznych dla różnych położenia pary jonów manganu. We wszystkich przypadkach dokonano również obliczeń przewidujących stan podstawowy takiej pary, jeżeli chodzi o jego własności magnetyczne – ferromagnetyczne lub antyferromagnetyczne ustawienie spinów. Ponadto Autorka przeprowadziła porównania wyników przy pomocy funkcjonałów LDA i LDA+U, a także przeanalizowała wpływ optymalizacji geometrycznej kryształu. Rozdział 4 stanowi niewątpliwie olbrzymi zbiór wyników jak również materiał do dalszych możliwych analiz.

Jedyną uwagę jaką mam, to brak podstawowych danych, jeżeli chodzi o zastosowane pseudopotencjały. Z notki na stronie 20 wynika, że pseudopotencjały zostały utworzone przez Autorkę pracy przy pomocy programu `ld1.x`, a na stronie 48 jest jedno zdanie o kryterium akceptacji danego pseudopotencjału. Jednozdaniowa informacja o wygenerowaniu pseudopotencjałów przez Autorkę jest jeszcze na stronie 103 w Rozdziale 5. Brak dodatkowych danych wejściowych do programu `ld1.x` uniemożliwia, przynajmniej w miarę szybkie, powtórzenie wyników zawartych w pracy.

Rozdział 5 poświęcony jest anizotropii magnetycznej w objętościowych kryształach arsenku galu z manganem, przy czym główny nacisk jest położony na wyjaśnienie anizotropii w płaszczyźnie (001). Podstawą rozważań są wyniki Rozdziału 4, czyli preferencja określonego kierunku dimerów par jonów manganu na powierzchni rosnącego kryształu, co skutkuje później brakiem idealnej symetrii T_d w kryształach objętościowych. Autorka pracy koncentruje się na obliczeniach dla dwóch rodzajów par w superkomórce $2 \times 2 \times 2$, które powinny dawać wkład do wyrazów o symetrii C_{2v} . W dalszej części Rozdziału analizowany jest wpływ naprężeń na stale anizotropii magnetycznej.

Niestety, nie jest dla mnie jasne pojęcie równoważności par jonów manganu, o którym Autorka pisze w podrozdziale 5.4. Rozumiem, że z punktu widzenia symetrii T_d trzy pary składające się z atomu centralnego i najbliższych sąsiadów umieszczonych w płaszczyznach (100), (010) i (001) są równoważne. Natomiast w danym problemie oprócz położenia atomów w przestrzeni dochodzi dodatkowy istotny element, a mianowicie kierunek spinu, i takie trzy pary dają całkowicie różne wyniki dla energii anizotropii magnetycznej jako funkcji kierunku spinu. Rozumiem, że Autorka ograniczyła się do rozpatrzenia jedynie takich konfiguracji par jonów manganu, dla których symetrią kryształu jest C_{2v} , czyli obserwowana w eksperymencie. Uważam jednak, że ten punkt wymaga wyjaśnienia lub dalszej pracy. Pominięta jest również analiza członów czwartego rzędu w anizotropii magnetycznej, mimo że wzory 5.5 sugerują uwzględnienie tych wyrazów.

Rozdział 6 to krótkie podsumowanie najważniejszych wyników pracy, a w Rozdziale 7 przedstawione są propozycje dalszych możliwych badań.

Przedstawiona praca zawiera również dwa dodatki, w których dyskutowane są techniczne aspekty przeprowadzanych obliczeń. W szczególności pokazują one, że każdy wynik numeryczny przedstawiony w pracy może być traktowany z dużą dozą zaufania, ponieważ został on poprzedzony głęboką analizą zbieżności, która powinna być zawsze wykonywana przy tego rodzaju obliczeniach.

Część wyników pracy doktorskiej została już opublikowana. To co oprócz otrzymanych wyników, zasługuje moim zdaniem na szczególne podkreślenie to olbrzymi spis literatury. Dzięki temu praca może służyć jako swego rodzaju opracowanie wycinka problemu anizotropii magnetycznej, a nie tylko jako zbiór pewnych nowych wyników.

Praca zawiera drobne błędy redakcyjne. Na przykład, we wzorze 2.39 brakuje litery l , nad wzorem 3.2 zamiast numeru odnośnika jest znak zapytania, w trzeciej linii na stronie 111 jest K2 zamiast K1. Należy jednak podkreślić, że jako całość rozprawa jest przygotowana na bardzo wysokim poziomie. Widać bardzo duży nakład pracy Autorki w jej przygotowanie pod względem redakcyjnym.

Uważam, że recenzowana praca spełnia wszystkie warunki stawiane pracom doktorskim i wnioskuję o dopuszczenie mgr Magdaleny Popielskiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Dr hab. Andrzej Łusakowski, prof. nzw. IFPAN

Zapoznałem się z recenzją
17.8.2014 O. Barański