

Warszawa, 22.07.2011 r.

prof. dr hab. Piotr Bogusławski  
Instytut Fizyki PAN  
Warszawa

**Recenzja**  
**rozprawy doktorskiej mgr Agnieszki M. Werpachowskiej**  
**pt "Spin waves and the anomalous Hall effect in ferromagnetic (Ga,Mn)As"**

Rozprawa doktorska mgr. Werpachowskiej liczy 193 strony, cytuje 233 prace, i podzielona jest na 11 rozdziałów oraz dodatek poświęcony opisowi metod numerycznych. Staranna pod względem edytorskim praca napisana jest bardzo dobrą angielszczyzną. Trzon pracy stanowią rozdziały 7-10, przedstawiające metody obliczeniowe i oryginalne wyniki autorki.

Bezpośrednią motywacją pracy były doświadczenia przeprowadzone w grupie prof. Ohno, których wyniki przedstawiono w pracach 35 i 36 (ruch ścian domen wymuszony prądem elektrycznym), oraz w pracy 37 dotyczącej anomalnego efektu Halla, którego pani Werpachowska jest współautorem. Znaczna część wyników przedstawionych w rozprawie została już opublikowana w 2 pracach w Phys. Rev. B (prace 46 i 47) i jednej w Phys. Rev. Lett. (praca 37).

Rozdział wstępny sytuuje badania pani Werpachowskiej na szerszym tle prowadzonych obecnie w wielu ośrodkach prac dotyczących spintroniki, jednej z najaktywniej rozwijanych dziedzin w fizyce ciała stałego. Szczególne miejsce w spintronice zajmuje GaMnAs, sztandarowy półprzewodnik będący ferromagnetykiem dla zawartości Mn rzędu 2-5 %, któremu poświęcono setki prac doświadczalnych i teoretycznych. Ogromny wysiłek badawczy nie przełożył się jednak na głębokie zrozumienie podstawowych własności magnetycznych GaMnA. Jest to spowodowane m.in. dużym rozbieżnościami pomiędzy literaturowymi wynikami doświadczalnymi.

Jak słusznie zwraca uwagę pani Werpachowska, zasadniczym problemem jest zapewne struktura krystaliczna badanych próbek. Ze względu na to, że granica rozpuszczalności Mn w GaAs jest rzędu  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , typowe próbki GaAs zawierające 3% Mn są roztworami przesyconymi. Konieczne jest użycie epitaksjalnych technik wzrostu GaMnAs w warunkach, w których niejednorodności składu i obecność defektów punktowych są nieuniknione. Ograniczona po-

wtarzalność wyników doświadczalnych jest więc w znacznej mierze wynikiem ograniczonej powtarzalności morfologii warstw. Co więcej, morfologia wpływać może w sposób jakościowy na jej własności magnetyczne czy transportowe. W konsekwencji, z jednej strony nie możemy oczekiwać zadowalającej zgodności rozwijanych teorii z doświadczeniem. Z drugiej jednak strony obliczenia takie jak przeprowadzone w pracach pani Werpachowskiej są bardzo istotne, gdyż nie tylko wyjaśniają fizykę badanych układów określając np. namagnesowanie czy anomalny efekt Halla w warstwach idealnych krystalicznie, lecz także uwydatniają rolę niedoskonałości morfologii.

Recenzent nie podziela optymizmu pani Werpachowskiej w sprawie możliwych zastosowań GaMnAs i innych półprzewodników tej rodziny w spintronice. Stwierdzenie "III-V crystals with Mn are perfect candidates for the device which can realize the full potential of the spintronics..." jest stwierdzeniem na wyrost: trudno realistycznie przypuszczać, że uda się osiągnąć ferromagnetyzm w temperaturze pokojowej. Nie zmienia to faktu, że dobra nauka, np. zrozumienie fizyki GaMnAs, jest wartością samą w sobie, i doktorat pani Werpachowskiej należy oceniać przede wszystkim z tego punktu widzenia.

Bardziej szczegółowe omówienie rozprawy należy zacząć od rozdziału 3, który przedstawia podstawowe efekty fizyczne określające własności magnetyczne i transportowe GaMnAs, w szczególności moment magnetyczny Mn, rolę naprężeń i makroskopowych deformacji warstw, itd. Rozdział czwarty zawiera omówienie źródła ferromagnetyzmu GaMnAs, którym jest oddziaływanie wymienne między zlokalizowanymi momentami Mn a swobodnymi dziurami w paśmie walencyjnym. Autorka przedstawia schematycznie oddziaływania nadwymiany, podwójnej wymiany i mechanizm Bloemberga-Rowlanda, oddziaływanie RKKY i model Zenera. Struktura pasmowa GaMnAs jest omówiona jakościowo w rozdz. 5. Dwoma podstawowymi dla końcowych wyników efektami jest brak symetrii inwersji GaAs (czego konsekwencje omówione są również w tym rozdziale) i oddziaływanie spin-orbita. Autorka przedstawia też szczegółowo zaburzenia struktury pasmowej wynikające z deformacji warstw, oraz hamiltonian sprzężenia sp-d. Pani Werpachowska zaznacza tu, że dzięki symetrii blendy cynkowej sumowania po strefie Brillouina można było ograniczyć do 1/48 strefy. Wydaje się to błędne: nieprzywiedlna część strefy Brillouina to 1/24 część strefy, i można się spodziewać błędów czy niedokładności wynikających z tego założenia. (1/48-ą część strefy należy używać w strukturze diamentu, z symetrią inwersji).

W rozdziale 6 przedstawione są dwa podejścia do obliczeń struktury pasmowej GaMnAs. Pierwszym jest metoda kp, w wersji 6-cio i 8-mio pasmowej (czyli odpowiednio podejście Kohna-Luttingera i Kane'a). Autorka nie podała związku stałych takich jak  $A'$ ,  $P_0$  czy  $B$  z elementami macierzowymi w bazie użytej w rachunkach. Drugim podejściem jest metoda ciasnego wiązania (w wersji 5 i 10 orbitali na atom). Zauważmy, że różnice między energiami pasm otrzymanymi przy użyciu podejścia Kane'a i 8-pasmowego modelu kp są bardzo niewielkie. W obu podejściach wpływ jonów Mn w GaAs na strukturę elektronową uwzględniony jest jedynie w hamiltonianie sp-d. Zaniedbany jest akceptorowy charakter jonów Mn (czyli ich potencjał kulombowski), co może mieć wpływ na kształt pasm i gęstość stanów w okolicy wierzchołka pasma walencyjnego, i w konsekwencji na badane efekty, które – jak to wynika z rozdz. 9 i 10 – są czułe na szczegóły struktury pasmowej. Autorka nie wspomina tu także o problemie pasma domieszkowego indukowanego obecnością Mn w GaMnAs. Problem ten jest oczywiście kontrowersyjny, lecz powinien zostać tu zasygnalizowany.

Rozdział 7 poświęcony jest ferromagnetyzmowi GaMnAs. Autorka stosuje eleganckie podejście rekursywne do opisu statystyki spinów Mn, i magnetyzmu w modelu pola średniego. Wyższe stany pasmowe uwzględnione są przy pomocy rachunku zaburzeń Loewdina, który pozwala na wyprowadzenie efektywnego oddziaływania Mn-Mn za pośrednictwem swobodnych dziur. Niestety, część oznaczeń we wzorach 7.14-7.17 (str. 94-95) jest niedokładnie objaśniona. W standardowym podejściu opisanym np. w cytowanej książce Bira i Pikusa, w członach opisujących sprzężenie z wyższymi pasmami w drugim rzędzie mianownik energetyczny jest różnicą energii stanów jednocząstkowych, a nie energii całkowitych stanów wielocząstkowych użytych przez autorkę. W drugiej części rozdziału wyprowadzony jest efektywny hamiltonian oddziaływania między spinami jonów Mn w przybliżeniu pola średniego, i pokazane jest iż sprzężenie Bloemberga-Rowlanda znika.

W rozdziale 8 przedstawione są wyniki obliczeń temperatury Curie i anizotropii jednoosiowej magnetyzacji w GaMnAs w modelu 8-pasmowym i w modelu spds\*. Porównanie otrzymanych wyników, rys. 8.2 oraz 8.3, wskazuje, że modele 6- i 8-pasmowe dają wyniki bardzo bliskie do wyników ciasnego wiązania spds\*, przy czym rozbieżności rosną ze wzrastającą koncentracją Mn. Rysunek 8.1 pokazuje, że temperaturowa zależność magnetyzacji jest dobrze opisana modelem pola średniego, niestety autorka nie specyfikuje wartości parametrów i modelu użytego w obliczeniach.

Efektywne oddziaływanie spin-spin otrzymane w rozdz. 7 posłużyło autorce do analizy fal spinowych i sztywności magnetycznej w rozdziale 9. Autorka wprowadza fale spinowe i podaje ich dyspersję w objętościowym GaMnAs, oraz zwraca uwagę na fakt, iż częstość magnonów w  $q=0$  jest niezerowa, i dodatkowo w cienkich warstwach minimum krzywej dyspersji jest przesunięte z punktu  $q=0$  w wyniku braku symetrii inwersji. Interesujące jest też przejście od opisu atomowego do opisu do w języku mikromagnetyzmu ośrodka ciągłego, dokonane w części 9.2. W ciekawej części 9.4 autorka wykazuje, że w warstwach GaMnAs magnetyzacja ma strukturę cykloidalną w stanie podstawowym. Autorka analizuje następnie "powierzchniowe" mody związane międzypowierzchniami cienkich warstw, oraz niekolinearne konfiguracje spinów stanu podstawowego w warstwach. Obliczona znormalizowana sztywność fal spinowych jest o rząd wielkości większa od wartości otrzymanej dla prostego pasma parabolicznego. Jak zauważa autorka, w świetle otrzymanych przez nią wyników uzasadnienia tego efektu proponowane uprzednio w literaturze nie wydają się słuszne.

Wkład magnonów do magnetyzacji rozpatrzony jest w części 9.6. Porównanie wyników metody pola średniego z prawem Blocha i prawem Blocha zmodyfikowanym przez skończoną częstość magnonów w  $q=0$  wskazuje na nietrywialny wkład magnonów w obszarze niskich, a zwłaszcza pośrednich temperatur (czyli  $T$  rzędu  $T_C/2$ ). Rozdział 9 kończy porównanie wyników rozwiniętych przez panią Werpachowską modeli z doświadczeniem. W obszarze niskich i pośrednich temperatur zmodyfikowane prawo Blocha daje bardzo dobrą zgodność z doświadczeniem, podczas gdy w obszarze wysokich temperatur dobrą zgodność daje model pola średniego. Z drugiej strony, obliczona wartość stałej sztywności wymiany jest jednak co najmniej dwukrotnie większa od wartości doświadczałnej dla GaMnAs, podczas gdy dla GaMn(As,P) zgodność jest lepsza. Teoria zaniża także wartość całki wymiany  $J$  o czynnik 2. Należy jednak podkreślić, że dane doświadczalne dotyczące sztywności fal spinowych charakteryzują się dużym rozrzutem, różniąc się między sobą o rząd wielkości. Wartości obliczone przez panią Werpachowską mają prawidłowy rząd wielkości, co – w odróżnieniu od autorki – uważam za wynik zadowalający na obecnym etapie badań.

Rozdział 10 poświęcony jest anomalnemu efektowi Halla. Autorka atakuje problem używając formalizmu krzywizny Berry'ego do obliczenia odpowiednich składowych tensora przewodnictwa, oraz modeli  $k_p$  i ciasnego wiązania do opisu energii pasm GaMnAs. Model ciasnego wiązania z bazą  $sp^d$ \* jest tu najbardziej odpowiedni, gdyż automatycznie zawiera efekty związane z brakiem symetrii inwersji. Autorka dyskutuje szczegółowo zależność od koncen-


tracji dziur i znaku naprężeń warstwy GaMnAs. Porównanie z doświadczeniem (rys. 10.7) pokazuje, że model ciasnego wiązania prowadzi do zadowalającej w moim odczuciu zgodności z doświadczeniem jeśli uwzględnić skończony czas życia nośników spowodowany rozpraszaniem. Bardzo istotnym wynikiem jest tu przede wszystkim pokazanie wysokiej czułości efektu na szczegóły struktury pasmowej i położenie poziomu Fermiego, co powoduje iż trudno oczekiwać ilościowej zgodności teorii z eksperymentem.

Rozprawa nie jest wolna od uchybień. Część z nich ma charakter formalny (niekompletny opis wyprowadzeń, wzorów, użytych metod czy wartości parametrów), i wspomniałem o nich powyżej, część z nich ma charakter merytoryczny:

- dziura związana na Mn nie jest "stanem antywiążącym o charakterze  $p(As)$ ", str. 29,
- autorka utożsamia krystaliczność sieci z istnieniem symetrii translacyjnej, str. 30 ("In fact, GaAs lattice with Mn is not even crystalline"),
- str 33, przypis historyczny dotyczący zasady Pauliego czy uwagi dotyczące oddziaływania wymiennego i spin-orbitalnego są niezbyt dokładne,
- struktura blendy cynkowej nie posiada symetrii inwersji po prostu, a nie tylko w środku wiązania, str 54,
- metoda pseudopotencjału jak najbardziej daje możliwość powiązania teorii z doświadczeniami optycznymi (str. 60). Początkowe prace Cohena et al. bazowały wyłącznie na doświadczeniach optycznych,
- stwierdzenie, iż fale płaskie są lepsze do opisu stanów przewodnictwa, zaś orbitale atomowe do opisu stanów walencyjnych (str. 70) jest nieprawdziwe,
- metoda ciasnego wiązania była znana przed pracą Kostera i Slatera z r. 1954, str 70,
- nieporozumieniem jest włączenie metody ab initio ze zlokalizowaną bazą do rodziny "empirycznego ciasnego wiązania" (str.70), podejścia te są zasadniczo różne.

Podsumowując, rozprawa pani Werpachowskiej dotyczy fundamentalnych własności GaMnAs, czyli zależności magnetyzacji od podstawowych parametrów materiałowych, anizotropii jednoosiowej, fal spinowych i ich sztywności, itd., oraz anomalnego efektu Halla. Otrzymane wyniki wymagały dużego wkładu pracy przy opracowaniu programów, wysiłku intelektualnego niezbędnego do przeprowadzenia zaawansowanych obliczeń analitycznych, opanowania szerokiego zakresu tematycznego oraz przeprowadzenia szczegółowej analizy wyników. Z tego punktu widzenia pracę pani Werpachowskiej należy ocenić bardzo wysoko. Wstęp i podsumowanie rozprawy pokazują szeroką wiedzę i horyzonty autorki.

Mimo wymienionych powyżej uchybień, przedstawiona rozprawa z całą pewnością spełnia wymogi stawiane pracom doktorskim, i wnoszę o dopuszczenie pani Werpachowskiej do jej publicznej obrony.

  
Piotr Bogusławski