

Wybitny fizyk Werner Heisenberg postulował w 1928, że jedynie orbitale d lub f prowadzą do magnetyzmu. Jednak po prawie siedemdziesięciu latach pokazano, zarówno teoretycznie, jak i doświadczenie, że ferromagnetyzm (FM) występuje w układach zawierających jedynie elektrony s i p [1], czasem określane jako magnetyzm d0 (czyli bez udziału orbitali d). FM zaobserwowano w układach molekularnych nawet w temperaturze pokojowej [2]. W ciałach stałych zjawisko to prowadzi do nieznikającej polaryzacji spinowej i przejawia się, zarówno (a) „lokalnie” - jako zlokalizowane stany wysokospinowe (high-spin, HS) defektów, np. luki (V) kationowych w GaP [3] i (b) „globalnie”, np. jako kolektywny FM układów: w tlenkach II-VI, azotkach III-V, czy też materiałach na bazie węgla, w których momenty spinowe są związane z obecnością defektów lub domieszek z drugiego wiersza układu okresowego (C, N, O) [4,5]. Stabilność stanu HS defektu, jak i FM układu, zależy od wielu czynników, jednak na pewno są skorelowane z silną polaryzacją spinową elektronów orbitali 2p atomów C, N, i O, porównywalną do polaryzacji spinowej orbitali d metali przejściowych [1]. Celem zaproponowanego projektu jest teoretyczna analiza, przy użyciu metod teorii funkcjonalnego gstości (DFT), stabilności oddziaływań ferromagnetycznych pomiędzy lokalnymi centrami magnetycznymi w GaN, BN, SiC i ZnO. Rozpatrzone zostaną własności magnetyczne i elektronowe luki, dwuluki, kompleksów typu luka-domieszka z drugiego wiersza układu okresowego w SiC i azotkach III-V. Analiza obejmie przede wszystkim układy obrotowe, lecz plan obejmuje także nanodruki (QWs) i kropki kwantowe (QDs). Badania powinny pokazać, że stabilność stanu HS defektu, jak i FM układu, zależy od symetrii defektu, która może być łamana przez efekty typu Jahn-Tellera, zmiany wymiarowość układu, stopnia lokalizacji funkcji falowych defektów oraz także od opisu silnych oddziaływań wymiany-korelacji charakteryzujących elektrony na orbitalach 2p.

Sprawą zasadniczą dla projektu jest poprawny opis struktury elektronowej. Znaną słabość jest przybliżenie lokalnej gstości (LDA) lub uogólnionych gradientów (GGA) jest zaniżanie wartości przerwy wzbronionej E_{gap} półprzewodników. Poprawne wartości przerwy można uzyskać stosując półempiryczne podejście LDA+U (GGA+U) [6], w którym obliczenia LDA uzupełnia się wprowadzeniem poprawek +U dla określonych orbitali atomowych. Niestety uwzględnienie członu +U pogarsza zgodność z doświadczeniem struktury elektronowej, np. w przypadkach izolowanych jonów Mn i Fe w GaN [7]. Zasadniczym pytaniem jest więc, czy niedokładność teorii LDA/GGA dotyczy jedynie orbitali d, czy też jest to ogólniejszy problem. Z tego punktu widzenia defekty punktowe należą uważać za "poligon" badawczy dla teorii, a zgodność obliczonych energii stanów defektowych w przerwie jest kryterium równie istotnym co sama wartość E_{gap} , na której koncentrowała się dotychczas teoria. Drugim, niejako równoległym, celem projektu jest więc zbadanie stosowności poprawek +U do orbitali p.

Proponowana tematyka badań jest kontynuacją dotychczasowej pracy, w tym wyników otrzymanych w ostatnich latach [1, 8,9]. Analiza magnetyzmu związków IIA-V, podobnie jak i wyznaczenie struktury elektronowej i spinowej luki w III-V azotkach i II-VI tlenkach, pozwoliła zidentyfikować mechanizm odpowiedzialny za własności magnetyczne tych układów. Zarówno polaryzacja spinowa materiału obrotowego, jak i polaryzacja spinowa lokalnego momentu magnetycznego, są związane z polaryzacją spinową powłoki p atomów tworzących kryształ, albo jak w przypadku luki z polaryzacją spinową powłoki walencyjnej p atomów tworzących stany na zerwanym wiązaniach. Przeprowadzone ostatnio obliczenia wykazały, że uwzględnienie poprawek +U może mieć zasadnicze znaczenie nie tylko dla struktury pasmowej, lecz także dla określenia stabilności polaryzacji spinowej defektów i domieszek. Proponowane badania mają na celu głębsze zrozumienie owych współzależności, i obejmują problemy, które nie poznawczo, takie jak struktura elektronowa i spinowa defektów, rola lokalizacji ich funkcji falowych, czy też stabilność kolektywnej fazy magnetycznej. Z drugiej strony, przedmiotem badań są defekty, które z punktu widzenia mogą być używane, takie jak kompleks VN w diamencie czy lukadwuluka w SiC.

Możliwe zastosowania zlokalizowanych w kryształach spinów elektronów do bezpiecznej komunikacji czy do budowy komputerów kwantowych spowodowało zainteresowanie fizyków defektami w diamencie i krzemie. W szczególności kompleks luka-atom N (VN) w diamencie i domieszka P w Si charakteryzują się najlepszą dotychczas koherencją spinową (czyli czasem życia elektronu w przygotowanym stanie spinowym). Badania własności pojedynczych spinów zlokalizowanych na defektach nie ograniczają się jednak do tych kompleksów. W ostatnim czasie pokazano, że defekty w SiC mają podobne własności, np. czas koherencji spinowej luki w SiC jest rzędu 1 ms, co całkowicie uzasadnia zainteresowanie tymi centrami. Jednym z celów projektu jest porównanie własności elektronowych i magnetycznych defektu VN z podobnym defektem, czyli paraluka-tlen podstawieniowy VO w GaN, InGaN i BN, a także luki i kompleksów defektów w SiC jako potencjalnych kandydatów do zastosowania w spintronice kwantowej. Przedmiotem obliczeń będzie struktura elektronowa defektu, czyli energie poziomów wprowadzanych przez defekt, oraz jego stan spinowy w zależności od

stanu ładunkowego.

W ostatniej dekadzie po wi cono wiele uwagi półprzewodnikom domieszkowanym metalami przej ciowymi, w szczególno ci GaN. Poprawny opis stanów p(N) jest istotny , a orbitale p anionów takich jak azot czy tlen odgrywaj istotn rol w magnetyzmie, np. GaN:Mn i GaN:Fe. W pewnym sensie jest to oczywiste: hybrydyzacja sp-d le ca u podstaw magnetyzmu półprzewodników powoduje, i własno ci magnetyczne zwi zane s z własno ciami stanów walencyjnych, które z kolei zbudowane s w znacznej mierze z orbitali p anionów. Aktywny wpływ anionów tworzcych matryc nie został do tej pory jak dot d wła ciwie rozpoznany i zanalizowany w obliczeniach teoretycznych z pierwszych zasad. Planowane badania roli anionów przeprowadzone zostan dla ZnO domieszkowanego Cu. Dotychczasowe moje badania obj ły zagadnienie magnetyzmu zwi zków II-V, luk kationowych w zwi zkach III-V, II-VI i I-IV oraz własno ci magnetycznych tych zwi zków domieszkowanych metalami przej ciowymi. W projekcie zaplanowane rozszerzenie przeprowadzonych bada na stany spinowe luk, kompleksów luka-domieszka, domieszek typu Cu i sprz e mi dzy nimi w półprzewodnikach. Maj na celu wykazanie, e ich ródem jest ten sam efekt fizyczny: silna polaryzacja spinowa orbitali p lekkich atomów z drugiego wiersza układu okresowego. Wyodrebnienie wspólnego mechanizmu odległych na pierwszy rzut oka efektów jest czymś co wg mnie powinno wej na stałe do teorii magnetyzmu półprzewodników.

[1] O. Volnianska and P. Bogusławski, J. Phys. Cond. Matter. 22, 073202 (2010).
[2] S. J. Blundell and F. L. Pratt, J. Phys.: Condens. Matter 16 R771 (2004).
[3] T. A. Kennedy et al., Phys. Rev. Lett. 50, 1281 (1983).
[4] J. Cervenka et al., Nat. Phys. 5, 840 (2009).
[5] P. Esquinazi et al., Phys. Rev. Lett. 91, 227201 (2003).
[6] M. Cococcioni and S. de Gironcoli, Phys. Rev B 71, 035105 (2005).
[7] O. Volnianska, T. Zakrzewski, and P. Bogusławski, J. Chem. Phys. 141, 114703 (2014).
[8] O. Volnianska and P. Bogusławski, J. Phys. D: Appl. Phys. 47 465101 (2014).
[9] O. Volnianska and P. Bogusławski, Phys. Rev. B 83, 205205 (2011).