

Autoreferat

Małgorzata Wierzbowska

Osiągnięcie naukowe:

“Własności nowoczesnych materiałów otrzymane z pierwszych zasad oraz wkład w rozwój metod obliczeniowych”

Spis treści

1. Stopnie naukowe
2. Staże za granicą
3. Dane bibliometryczne
4. Spis publikacji przed doktoratem
5. Spis publikacji po doktoracie
6. Wkład w rozwój kodów komputerowych
7. Osiągnięcie naukowe – spis publikacji stanowiących cykl będący podstawą postępowania habilitacyjnego
8. Osiągnięcie naukowe – opis zjawisk fizycznych i rozwój metod

Stopnie naukowe

30 czerwca 1994, magister fizyki teoretycznej,

Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Polska,

temat: *Obliczenia struktury elektronowej sond luminescencyjnych.*

opiekun - Prof. Wiesław Nowak

26 października 1994, magister fizycznych podstaw mikroelektroniki,

Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Polska,

temat: *Przewodnictwo hoppingowe w granicy dużych częstotliwości pola elektrycznego.*

opiekun - Dr. hab. Jan Maćkowiak

7 czerwca 2000, doktor fizyki teoretycznej,

Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Polska,

temat: *Ab Initio Calculations for the Adsorption of Oxygen and Potassium on the Cr₂O₃(0001) Surface.* (praca w języku angielskim)

opiekun - Dr. hab. Jan Wasilewski

Staże za granicą

- Marzec 1998 – maj 1998 (podczas studiów doktoranckich)
Lehrstuhl fuer Theoretische Chemie, Ruhr-Universitaet Bochum, Niemcy
Finansowane przez Graduiertenkolleg "Dynamische Prozesse an Festkoerperoberflaechen – Adsorption, Reaktion, heterogene Katalyse", praca w grupie Prof. Volker Staemmler
- Wrzesień 1998 – luty 1999, maj – czerwiec 1999, wrzesień – październik 1999
Lehrstuhl fuer Theoretische Chemie, Ruhr-Universitaet Bochum, Niemcy
(podczas studiów doktoranckich) Roman Herzog Fellowship, praca z Prof. Volker Staemmler
- Październik 2000 – wrzesień 2001, staż podoktorski, program THEONET II EU,
Theoretical Chemistry Department, Chemical Center, University of Lund, Szwecja
praca w grupie Ass. Prof. Roland Lindh
- Październik 2001 – luty 2002, Hertie Fellowship, praca w grupie Prof. E.K.U. Gross
Universitaet Wuerzburg, Theoretische Physik I, Niemcy
- Marzec 2002 – lipiec 2002, praca z Prof. Stefano de Gironcoli
SISSA, Katedra Materii Skondensowanej, Triest, Włochy
Sierpień 2002 Październik 2002, praca z Prof. E. Tosatti
ICTP, Katedra Materii Skondensowanej, Triest, Włochy
- Listopad 2002 listopad 2003, praca w grupie Prof. Stefano Sanvito
Trinity College, Physics Department, Dublin, Irlandia (kilkutygodniowy pobyt w **Donostia Theoretical Centre, Hiszpania, współpraca z Dr Daniel Sanchez-Portal**)
- Grudzień 2003 Luty 2005, praca w grupie Prof. E. Tosatti
INFN, Katedra Materii Skondensowanej, Triest, Włochy
- Lipiec 2005 – ma 2007, praca z Prof. Maria Peressi
Trieste University, Katedra Materii Skondensowanej, Triest, Włochy

Obecnie

Sierpień 2011 – czerwiec 2014, adiunkt naukowy na Uniwersytecie Warszawskim,
Wydział Fizyki, Instytut Fizyki Teoretycznej, Katedra Fizyki Materii Skondensowanej,
praca w projekcie SiCMAT (<http://sicmat.materials.pl/>)

Dane bibliometryczne

sumaryczny impakt	51.4	(w tym po doktoracie 43)
liczba cytowań	210	(w tym 14 do arXiv, 22 własne)
średnia liczba cytowań na publikację	10.5	
indeks Hirsch'a	7	(+ 1 arXiv)

Cytowania obejmują tylko publikacje w Web of Science, nie kody komputerowe.
Poprzez cytowania własne rozumiem cytowania wszystkich współautorów.

Spis publikacji przed doktoratem

- [1] W. Nowak and **M. Wierzbowska**
“*A theoretical study of geometry and transition moment directions of flexible fluorescent probes– acetoxo derivatives of phenylanthracene*”
Journal of Molecular Structure (Theochem), vol. 368, p. 223-234 (1996)
Impakt 1.453, cytowań 7 (0 własnych)
- [2] J. Szubiakowski, A. Balter, W. Nowak, A. Kowalczyk, K. Wiśniewski and **M. Wierzbowska**
“*Anisotropic reorientation of perylene and 3,9-dibromoperylene in glycerol: fluorescence anisotropy decay and quantum-mechanical study*”
Chemical Physics, vol. 208, p. 283-296 (1996)
Impakt 2.059, cytowań 15 (0 własnych)
- [3] J. Wasilewski, S. Zelek and **M. Wierzbowska**
“*Modifications of Virtual Orbitals in the Limited CI Calculations for Electron-Rich Molecules*”
International Journal of Quantum Chemistry, vol. 60, p. 1027-1036 (1996)
Impakt 1.306, cytowań 4 (0 własnych)
- [4] W. Zhao, G. Kerner, M. Asscher, X.M. Wilde, K. Al-Shamery, H.-J. Freund, V. Staemmler, and **M. Wierzbowska**
“*Interaction and diffusion of potassium on Cr₂O₃(0001)/Cr(110)*”
Physical Review B, vol. 62, p. 7527-7534 (2000)
Impakt 3.603, cytowań 15 (4 własne)

Spis publikacji po doktoracie

- [1] J. W. Krogh and **M. Wierzbowska**
“*The condensation energy of the homogeneous superconducting gas*”
Computer Physics Communications, vol. 150, p. 53-63 (2003)
Impakt 3.212, cytowań 1 (1 własne)
- [2] D. Ajitha, **M. Wierzbowska**, R. Lindh and P. A. Malmqvist
“*Spin-orbit ab initio study of alkyl halide dissociation via electronic curve crossing*”
Journal of Chemical Physics, vol. 121, p. 5761-5766 (2004)
Impakt 3.176, cytowań 35 (0 własnych)
- [3] **M. Wierzbowska**, M. Lueders and E. Tosatti
“*Multiplet structures of charged fullerenes*”
Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, vol. 37, p. 2685-2698 (2004)
Impakt 2.031, cytowań 10 (1 własne)
- [4] **M. Wierzbowska**, D. Sanchez-Portal and S. Sanvito
“*Different origins of the ferromagnetic order in (Ga,Mn)As and (Ga,Mn)N*”
Physical Review B, vol. 70, 235209-1-11 (2004)
Impakt 3.603, cytowań 79 (10 własnych)
- [5] **M. Wierzbowska**, S. de Gironcoli, J. W. Krogh and P. Giannozzi
“*Condensation energy and T_c within the density functional theory for superconductors*”
AIP Conference Proceedings, vol. 789, p. 289-299 (2005)
proceedings from “IX Training Course in the Physics of Correlated Electron Systems and High- T_c Superconductors”, Vietri sul Mare (Salerno), Italy, 4-15 October, 2004
cytowań 0
- [6] **M. Wierzbowska** and J. W. Krogh
“*Condensation energy of the homogeneous electron gas from density-functional theory for superconductors*”
Physical Review B, vol. 71, 014509-1-9 (2005)
Impakt 3.603, cytowań 1 (1 własne)
- [7] **M. Wierzbowska**
“*Effect of spin fluctuations on T_c from density-functional theory for superconductors*”
The European Physical Journal B, vol. 48, p. 207-217 (2005)
Impakt 1.282, cytowań 1 (0 własnych)
- [8] **M. Wierzbowska**, A. Delin and E. Tosatti
“*Effect of electron correlations in Pd, Ni, and Co monowires*”
Physical Review B, vol. 72, 035439-1-10 (2005)
Impakt 3.603, cytowań 25 (1 własne)
- [9] **M. Wierzbowska**, S. de Gironcoli and P. Giannozzi
“*Origins of low- and high-pressure discontinuities of T_c in niobium*”
ARXIV0504077, p. 1-15 (2006)
cytowań 14 (1 własne)

- [10] **M. Wierzbowska** and A. Fleszar
“Density functional theory calculations for a single Re impurity in silicon”
Physical Review B, vol. 83, 184418-1-6 (2011)
Impakt 3.603, cytowań 2 (2 własne)
- [11] **M. Wierzbowska** and J. Majewski
“Forces and atomic relaxation in density functional theory with the pseudopotential self-interaction correction”
Physical Review B, vol. 84, 245129-1-9 (2011)
Impakt 3.603, cytowań 2 (2 własne)
- [12] **M. Wierzbowska**
“Exchange interactions and Tc in rhenium-doped silicon: DFT, DFT+U and Monte Carlo calculations”
Journal of Physics Condensed Matter, vol. 24, 126002-1-7 (2012)
Impakt 2.355, cytowań 0
- [13] **M. Wierzbowska**
“Poisoning of magnetism in silicon doped with Re, caused by a charge transfer from interstitials to substitutionals, by means of the self-interaction corrected density-functional approach”
Journal of Applied Physics, vol. 112, 013919-1-6 (2012)
Impakt 2.210, cytowań 0
- [14] **M. Wierzbowska**, A. Dominiak and K. Tokar
“CVD formation of graphene on SiC surface in argon atmosphere”
Physical Chemistry Chemical Physics, vol. 15, 8805-8810 (2013)
Impakt 3.829, cytowań 0
- [15] K. Z. Milowska, M. Woińska and **M. Wierzbowska**
“Contrasting elastic properties of heavily B- and N-doped graphene with random impurity distributions including aggregates”
The Journal of Physical Chemistry C, vol. 117, p. 20229-20235 (2013)
Impakt 4.814, cytowań 0
- [16] K. Z. Milowska and **M. Wierzbowska**
“Hole sp^3 -character and delocalization in (Ga,Mn)As revised with pSIC and MLWF approaches - newly found spin-unpolarized gap states of s-type below 1% of Mn”
Chemical Physics, vol. 430, p.7-12 (2014)
Impakt 2.059, cytowań 0
- [17] I.N. Demchenko, T. Tyliczszak, M. Chernyshova, K.M. Yu, J.D. Denlinger, D. Speaks, W. Walukiewicz, **M. Wierzbowska**, and K. Ławniczak-Jabłońska
“Electronic structure of irradiated CdO thin films”
ISSRNS 2012: Synchrotron Radiation in Natural Science Vol. 10, No. 1 - 2 (2012)
cytowań 0

Wkład do dużych kodów komputerowych:

K. Andersson, M. Barysz, A. Bernhardsson, M. R. A. Blomberg, Y. Carissan, D. L. Cooper, M. Cossi, T. Fleig, M. P. Fuelscher, L. Gagliardi, C. de Graaf, B. A. Hess, G. Karlstrom, R. Lindh, P.-A. Malmqvist, P. Neogady, J. Olsen, B. O. Roos, B. Schimmelpfennig, M. Schuetz, L. Seijo, L. Serrano-Andres, P. E. M. Siegbahn, J. Stalring, T. Thorsteinsson, V. Veryazov, **M. Wierzbowska**, P.-O. Widmark. **MOLCAS Version 5.2.** Dept. of Theor. Chem., Chem. Center, University of Lund, P.O.B. 124, S-221 00 Lund, Sweden, 2001.

pakiet SIESTA (metoda LDA+U i pierwsza wersja metody pSIC)

pakiet Quantum ESPRESSO (metoda pSIC i usprawnienie obliczeń sprzężenia elektron-fonon, pw2wannier)

Własne kody:

CHS: Energia kondensacji w przybliżeniu gazu jednorodnego (zrównoleglone przez J. W. Krogh)

Tc-SCDFT: Tc dla nadprzewodników z funkcją Eliashberga i fluktuacjami spinowymi

Osiągnięcie naukowe:

“Własności nowoczesnych materiałów otrzymane z pierwszych zasad oraz wkład w rozwój metod obliczeniowych”

Spis publikacji stanowiących cykl postępowania habilitacyjnego

- [1] **M. Wierzbowska**, D. Sanchez-Portal and S. Sanvito
“Different origins of the ferromagnetic order in (Ga,Mn)As and (Ga,Mn)N”
Physical Review B, vol. 70, 235209-1-11 (2004)
- [2] K. Z. Milowska and **M. Wierzbowska**
“Hole sp³-character and delocalization in (Ga,Mn)As revised with pSIC and MLWF approaches - newly found spin-unpolarized gap states of s-type below 1% of Mn”
Chemical Physics, vol. 430, p.7-12 (2014)
- [3] **M. Wierzbowska** and A. Fleszar
“Density functional theory calculations for a single Re impurity in silicon”
Physical Review B, vol. 83, 184418-1-6 (2011)
- [4] **M. Wierzbowska**
“Exchange interactions and T_c in rhenium-doped silicon: DFT, DFT+U and Monte Carlo calculations”
Journal of Physics Condensed Matter, vol. 24, 126002-1-7 (2012)
- [5] **M. Wierzbowska**
“Poisoning of magnetism in silicon doped with Re, caused by a charge transfer from interstitials to substitutionals, by means of the self-interaction corrected density-functional approach”
Journal of Applied Physics, vol. 112, 013919-1-6 (2012)
- [6] **M. Wierzbowska**, A. Delin and E. Tosatti
“Effect of electron correlations in Pd, Ni, and Co monowires”
Physical Review B, vol. 72, 035439-1-10 (2005)
- [7] J. W. Krogh and **M. Wierzbowska**
“The condensation energy of the homogeneous superconducting gas”
Computer Physics Communications, vol. 150, p. 53-63 (2003)
- [8] **M. Wierzbowska** and J. W. Krogh
“Condensation energy of the homogeneous electron gas from density-functional theory for superconductors”
Physical Review B, vol. 71, 014509-1-9 (2005)
- [9] **M. Wierzbowska**
“Effect of spin fluctuations on T_c from density-functional theory for superconductors”
The European Physical Journal B, vol. 48, p. 207-217 (2005)

- [10] **M. Wierzbowska**, M. Lueders and E. Tosatti
“*Multiplet structures of charged fullerenes*”
Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, vol. 37, p. 2685-2698 (2004)
- [11] **M. Wierzbowska**, A. Dominiak and K. Tokar
“*CVD formation of graphene on SiC surface in argon atmosphere*”
Physical Chemistry Chemical Physics, vol. 15, 8805-8810 (2013)
- [12] **M. Wierzbowska** and J. Majewski
“*Forces and atomic relaxation in density functional theory with the pseudopotential self-interaction correction*”
Physical Review B, vol. 84, 245129-1-9 (2011)

Osiągnięcie naukowe:***“Własności nowoczesnych materiałów otrzymane z pierwszych zasad oraz wkład w rozwój metod obliczeniowych”***

- **Magnetyzm – półprzewodniki magnetyczne i nanomagnetyzm**

Półprzewodniki domieszkowane atomami metali przejściowych często są ferro- lub antyferromagnetyczne, jednak rzadko zdarzają się doniesienia o temperaturze Curie przekraczającej temperaturę pokojową i nie stwierdzono jeszcze powtarzalności takich eksperymentów. Ich znaczenie w spintronice, ze względu na możliwość manipulacji spinem jako elementem logicznym, zasługuje na wysiłek w badaniach podstawowych. Najpopularniejszym rozrzedzonym półprzewodnikiem magnetycznym jest (Ga,Mn)As z temperaturą krytyczną 110-160 K. W cienkich warstwach (Ga,Mn)N znaleziono ferromagnetyzm w temperaturze pokojowej, tak samo jak w krzemie domieszkowanym renem. Zajmuję się tymi układami stosując metody obliczeniowe wychodzące poza popularną metodę funkcjonałów gęstości (ang. DFT).

Mechanizmy ferro- lub antyferromagnetyzmu w domieszkowanych półprzewodnikach są różne – obecnie można je zidentyfikować teoretycznie na podstawie struktury pasmowej. Kiedy zaczynałam badać te układy, w 2002 roku, opisy tych mechanizmów bazowały na przybliżeniu ciasnego wiązania i dwóch modelach Zenera: dla silnego sprzężenia *sp-d* z mocno zdelokalizowanymi dziurami lub dla dziury zlokalizowanej na stanach *d*. W pierwszym przypadku ferromagnetyzm jest przenoszony między domieszkami na duże odległości dzięki sprzężeniu momentów lokalnych ze spinem wolnych nośników jakimi są dziury; a wysokość temperatury krytycznej zależy od rozszczepienia spinowego góry pasma walencyjnego (lub w przypadku półprzewodników elektronowych, dołu pasma przewodnictwa). W drugim typie półprzewodników magnetycznych, silne oddziaływania między atomami metali są krótko zasięgowe i temperatury krytyczne opisuje model perkolacji. W takim przypadku tylko duże koncentracje domieszek mogą prowadzić do całkowitego namagnesowania próbki. Na ogół mamy tam do czynienia z klastrowaniem domieszek i domenami magnetycznymi. Struktura pasmowa takiego układu charakteryzuje się wąskim pasmem domieszkowym zlokalizowanym na poziomie Fermiego, a góra pasma walencyjnego nie rozszczepia się spinowo. Na podstawie tych modeli, Dietl i Ohno wytłumaczyli mechanizmy ferromagnetyzmu w bardzo rozcieńczonym (Ga,Mn)As i przewidzieli wysoką temperaturę krytyczną w (Ga,Mn)N. Gdy oba wymienione typy materiałów domieszkujemy elektronami wypełniając całkowicie dziury i przesuwając poziom Fermiego do przerwy między stanami obsadzonymi i nieobsadzonymi wtedy polaryzacja spinowa pasm pozostaje, ale dominują sprzężenia antyferromagnetyczne i tzw. mechanizm superwymiany. W roku 2010 wszystkie te mechanizmy zostały dokładnie przedstawione w obszernym artykule w Review of Modern Physics przez Sato i współautorów.

Na początku było mało danych dla parametrów materiałowych otrzymanych z pierwszych zasad. Półprzewodniki magnetyczne nie były ulubionymi materiałami do obliczeń *ab initio* ze względu na konieczność stosowania dużych komórek elementarnych jeśli koncentracje domieszek są małe. Także z powodu niedoskonałości metody przybliżenia lokalnego w podejściu funkcjonałów gęstości, które załamywało się przy opisie stanów zlokalizowanych jakimi są orbitale atomowe typu *d* i *f* oraz z powodu zaniżania wartości przerw energetycznych i niedoszacowania długości wiązań chemicznych. Te braki metody mają duży wpływ na otrzymane własności magnetyczne w tzw. materiałach silnie skorelowanych (z silnymi korelacjami elektronowymi na zlokalizowanych orbitalach), do których półprzewodniki magnetyczne się

zaliczają. Większość rachunków była przeprowadzona z użyciem metody przybliżenia lokalnego (ang. LSDA) lub z poprawkami gradientowymi (ang. GGA), a zastosowanie poprawki na oddziaływanie Coulomb'a w powłokach silnie skorelowanych (tzw. parametr U w metodzie DFT+ U) ograniczało się do małych komórek czyli dużych koncentracji. Użycie bardzo dokładnej metody GW lub GW+EXX w dużych komórkach elementarnych jest nadal nieosiągalne. Poprawki na samoodziaływanie elektronu na wszystkich powłokach atomowych w przybliżeniu pseudopotencjałów dopiero były formułowane kiedy wchodziłam w temat półprzewodników magnetycznych.

Moja pierwsza publikacja o półprzewodnikach magnetycznych wspólnie ze Stefano Sanvito i Danielem Sanchez-Portal: *“Different origins of the ferromagnetic order in (Ga,Mn)As and (Ga,Mn)N”* powstała przy użyciu programu SIESTA. Zaimplementowana była tylko metoda DFT. Pierwszym zadaniem jakie wtedy wykonałam było zaimplementowanie metody DFT+ U do tego kodu. Następnie przetestowanie implementacji dla układów, w których wyniki z tą metodą były już opublikowane; takich jak MnO, NiO, FeO. Kolejnym etapem było wykonanie obliczeń dla (Ga,Mn)As i (Ga,Mn)N: struktury pasmowej, gęstości stanów z rzutem na orbitale powłoki $3d$ manganu, przyjrzenie się analizie populacyjnej Mulliken'a. Już na tej podstawie można zróżnicować te dwa układy. Zastosowaliśmy metodę LSDA+ U , z $U=4.5$ eV i parametrem wymiany $J=1$ eV, dobranymi tak by stany $3d$ Mn były poniżej poziomu Fermiego w miejscu gdzie wskazują pomiary opto-spektroskopowe. Pozwoliło to bez wszelkich wątpliwości określić stan magnetyczny w (Ga,Mn)As jako d^5 Mn z dziurą sprzężoną antyferromagnetycznie, w wyniku czego całkowity moment magnetyczny wynosi $4\mu_B$. Sytuacja w (Ga,Mn)N jest bliższa konfiguracji d^4 niż $d^{3.5}$ jak to było w metodzie LSDA. Temperatura krytyczna w (Ga,Mn)As jest liniowo proporcjonalna do parametru wymiany N_β , a ten parametr zależy od rozszczepienia spinowego góry pasma walencyjnego, przeszacowanego w metodzie LSDA. Wartość jaką otrzymaliśmy z LSDA+ U , tzn. -2.8 eV, można lepiej dopasować do modelu wymiany p-d Zenera, a zależność tego parametru od koncentracji domieszek jest liniowa, i tylko dla $U=4.5$ eV uzyskaliśmy poprawny wynik braku polaryzacji spinowej w granicy braku domieszek – w LSDA lub dla innych parametrów U wartość N_β nie znika w tej granicy. Sprężenie magnetyczne między domieszkami w funkcji odległości jest ferromagnetyczne w obu materiałach dla krótkich i większych separacji między atomami Mn. Podstawowa różnica to spory zasięg tego sprzężenia w (Ga,Mn)As i bardzo krótki zasięg w (Ga,Mn)N. Po strukturze pasmowej, to jest kolejny dowód na odmienne mechanizmy rządzące magnetyzmem w tych półprzewodnikach: ferromagnetyzmu przeniesionego przez dziury w domieszkowanym arsenku galu, i mechanizmu podwójnej wymiany w domieszkowanym azotku galu.

Po latach wydawałoby się, że wszystko zostało już powiedziane o (Ga,Mn)As, jednak wróciłam do tego tematu w publikacji z Karoliną Milowską pod tytułem: *“Hole sp^3 -character and delocalization in (Ga,Mn)As revised with pSIC and MLWF approaches - newly found spin-unpolarized gap states of s-type below 1% of Mn”*. Skłoniły nas do tego nowe możliwości obliczeniowe; metody, które lepiej odwzorowują wiązania chemiczne i pozwalają dokładniej przeanalizować układ. Jedną z nich jest metoda pseudopotencjalnej poprawki na samoodziaływanie elektronu w każdej powłoce atomowej (ang. pSIC) – nie tylko d czy f jak to jest w metodzie LSDA+ U . Wcześniej zaprogramowałam pierwszą wersję tej metody w kodzie SIESTA a następnie w Quantum ESPRESSO. Ten drugi program użyliśmy w omawianej publikacji. Ponadto w międzyczasie rozwinęła się wręcz nowa “gałąź przemysłu obliczeniowego” jaką jest zastosowanie maksymalnie zlokalizowanych funkcji Wannier (ang. MLWF). Zrobiono więcej pomiarów dla małych koncentracji domieszek i niektóre z nich zostały błędnie zinterpretowane. Chodziło o stany domieszkowe, które pojawiają się w przerwie energetycznej, ich polaryzację spinową i skład orbitalny, czy stany $3d$ Mn przeważają w tych stanach czy nie, czy

pochodzą z góry pasma walencyjnego. Są to kluczowe pytania gdyż, wyjaśniają mechanizm ferromagnetyzmu i wskazują, który z wcześniej wspomnianych modeli Zenera powinien być użyty do opisu (Ga,Mn)As. W nowej publikacji rozszerzyliśmy zakres domieszkowań na koncentracje domieszek poniżej 1% Mn (co oznacza komórki elementarne powyżej 200 atomów). Analiza gęstości stanów rzutowanych na stany Mn i sąsiadów – bliskich i bardzo dalekich – oraz liczby obsadzeń funkcji Wannier wyraźnie wskazują na delokalizację funkcji gęstości dziury, której spora część znajduje się w środku komórki elementarnej. Tendencja jest bardziej widoczna w metodzie DFT+pSIC niż DFT. Ponadto kształt funkcji gęstości dziury zobrazony funkcjami MLWF wskazuje na charakter sp^3 z dużym wkładem orbitali atomowych typu $4p$ Mn. Okazuje się, że orbitale t_{2g} zbudowane ze stanów $3d$ Mn nie hybrydują tak bardzo z funkcjami $4p$ As jak sądzono do tej pory. Zupełnie nieoczekiwanie, przy małych koncentracjach Mn otrzymaliśmy stany domieszkowe w przerwie energetycznej, które nie separują się z pasma walencyjnego tylko z pasma przewodnictwa i są całkowicie typu s nie zawierając domieszki orbitali typu p czy d – stany całkowicie niespolaryzowane spinowo. To jest zupełnie nowy wynik wymagający potwierdzenia dokładniejszą metodą GW. Z tym tematem związane są moje dalsze plany. Nowe stany są całkowicie nieobsadzone a poziom Fermiego wciąż przebiega tuż pod granicą pasma walencyjnego, zatem ferromagnetyzm przy niskich koncentracjach nadal pozostaje. Doświadczalnie brak magnetyzmu w próbkach z małą ilością domieszek można wytłumaczyć skompensowaniem dziur domieszkami międzywęzłowymi, które są zawsze obecne ze względu na energię tworzenia bliską do tej dla domieszek podstawieniowych, a ich charakter jest podwójnie donorowy. Tak więc mechanizm dziurowy dla ferromagnetyzmu w (Ga,Mn)As pozostaje w mocy nawet przy niskich koncentracjach domieszek.

Jedno z nielicznych doniesień o półprzewodniku domieszkowanym metalami przejściowymi, który jest ferromagnetyczny w temperaturze pokojowej – nie potwierdzone publikacją doświadczalną – zostało nam przekazane w rozmowie przez Prof. R.R. Gałązkę, a dotyczyło krzemu domieszkowanego renem. Postanowiliśmy z Andrzejem Fleszarem zająć się tym tematem w publikacji: *“Density functional theory calculations for a single Re impurity in silicon”*. Ren jest elementem z tej samej kolumny układu okresowego co Mn, zappełniającym powłoki $5s$ i $5d$. Jednak podobnie do technetu – jak sprawdziłam – ren ma niską magnetyzację jako domieszka podstawieniowa w krzemie. Jego przewagą nad manganem jest silniejsze sprzężenie $p-d$ w Si. W każdym nowym układzie ważne jest stwierdzenie, która z pozycji domieszkowych ma najniższą energię tworzenia – dla Si:Re sprawdziliśmy pozycje: podstawieniową, międzywęzłową tetragonalną i hexagonalną, oraz “wymenną” z Re w pozycji tetragonalnej międzywęzłowej i usuniętym sąsiadem Si, i pozycję z podwójnym wakansem Si i renem w środku wiązania utworzonego przez atomy Si przed usunięciem. Okazało się, że najkorzystniejsze są pozycje podstawieniowa oraz tetragonalna. Magnetyzacja Re w krzemie wynosi $1\mu_B$ w pozycji podstawieniowej, a w pozycji międzywęzłowej tetragonalnej domieszka jest diamagnetyczna; powyższe wyniki pochodzą z metody GGA. W przeciwieństwie do Mn w GaAs i GaN, w Si:Re stany na poziomie Fermiego są typu e_g , a nie t_{2g} . Do tego półmetaliczność jest w spinie mniejszościowym, z fazą izolatora w spinie większościowym. Dla domieszki międzywęzłowej poziom Fermiego leży w paśmie przewodnictwa krzemu i to demagnetyzuje ren. Zastosowanie metody DFT+U nie zmienia wyniku DFT, gdyż zmiana potencjału Coulomb’a może przesunąć tylko stany, które nie leżą na poziomie Fermiego (poprawka rośnie z odstępem stanów od E_F). Domieszkowanie układu elektronami lub dziurami jest energetycznie możliwe tylko donorowo w przypadku Re podstawieniowego oraz akceptorowo w przypadku tetragonalnym; w obu wypadkach daje to wynik diamagnetyczny.

Dalsze badania dla Si:Re przeprowadziłam samodzielnie w publikacji: ***“Exchange interactions and T_c in rhenium-doped silicon: DFT, DFT+U and Monte Carlo calculations”***. Z rachunków dla jednej domieszki nie można ponad wszelką wątpliwość wnioskować o mechanizmie magnetyzmu, chociaż struktura pasmowa Si:Re sugerowałaby pośrednictwo dziur w globalnym ferromagnetyzmie próbki. Oddziaływania magnetyczne między parami domieszek podstawieniowych przeanalizowałam metodami DFT oraz DFT+U w szerokim zakresie odległości między atomami renu, we wszystkich konfiguracjach symetrycznych w komórkach do wielkości 256 atomów – co dawało wartości parametru wymiany mniejsze niż 1 meV na brzegach największej komórki elementarnej. Podałam również energie formacji par domieszek i moment magnetyczny przypadający na domieszkę przy starcie z konfiguracji ferro- lub antyferromagnetycznej. Najkorzystniejsze energetycznie okazały się dimery Re-Re w sąsiednich pozycjach węzłowych w krzemie, ale moment magnetyczny renu w takich parach zniknął w przypadku metody DFT, a pozostawał w metodzie DFT+U dla par przy ferromagnetyzmie starcie. Wszystkie sprzężenia magnetyczne, w przypadkach par dalszych niż najbliżsi sąsiedzi były dodatnie, czyli ferromagnetyczne, a największe wartości parametru wymiany otrzymałam dla par zorientowanych wzdłuż kierunku 110 w kryształ – mostki Re-Si-Re wzmacniały oddziaływania magnetyczne. Anizotropia była bardziej widoczna w metodzie DFT+U. Następnie przeprowadziłam klasyczne symulacje Monte Carlo w modelu Isinga z parametrami wymiany otrzymanymi w metodach DFT i DFT+U, używając własnego kodu MC dla sieci blendy cynkowej z przypadkowo rozmieszczonymi spinami. Wyniki były uśrednione po wielu konfiguracjach geometrycznych. Temperatury krytyczne dla fazy ferromagnetycznej osiągały temperaturę pokojową dla koncentracji domieszek 7% w przypadku oddziaływań magnetycznych otrzymanych z DFT oraz dla koncentracji 3% w przypadku parametrów otrzymanych z metody DFT+U. Najciekawszy efekt – superparamagnetyzm – znalazłam dla próbek statystycznych z parametrami DFT+U przy temperaturach dużo niższych od temperatury krytycznej. Polegał on na tworzeniu się domen magnetycznych, w przeciwieństwie do całkowitego namagnesowania się próbki w stanie ferromagnetycznym. Przyczyną tego efektu przy jednorodnym (nie klastrowym) rozmieszczeniu domieszek jest bardzo dalekozasięgowe oddziaływanie magnetyczne w parach Re-Re. Namagnesowanie wewnątrz “klastra” domieszek w sferze niezerowych oddziaływań jest tak silne, że odwrócenie spinu całego “klastra” kosztuje zbyt wiele energii aby mogła ona być przełamana poprzez bliskość kolejnej domeny w konfiguracji antyferromagnetycznej. Tymi optymistycznymi wynikami nie można jednak zakończyć badań nad układem, gdyż uwzględnienie poprawki na samooddziaływanie w powłokach s i p , a nie tylko d , może zmienić obraz magnetyzmu.

Po zaimplementowaniu metody pSIC w kodzie Quantum ESPRESSO, powróciłam do tematu Si:Re w publikacji: ***“Poisoning of magnetism in silicon doped with Re, caused by a charge transfer from interstitials to substitutionals, by means of the self-interaction corrected density-functional approach”***. Uwzględnienie poprawki na samooddziaływanie w krzemie poprawia lekko przerwę energetyczną, otwierając ją bardziej na tyle aby stany $3d$ Re w pozycji międzywęzłowej znalazły się tuż pod pasmem przewodnictwa. Ta drobna różnica w położeniu pasm domieszki względem struktury pasmowej krzemu powoduje spektakularne różnice w magnetyzmie: ren w pozycji międzywęzłowej tetragonalnej jest magnetyczny. W dodatku jest on donorem w stosunku do renu w pozycji podstawieniowej i oba przypadki mają podobne energie tworzenia – a więc kompensują się magnetycznie. Policzyłam energie tworzenia wszystkich par Re-Re, w których obie domieszki są podstawieniowe, lub międzywęzłowe, lub pary są mieszane; dla komórek do tej samej wielkości co we wcześniejszej publikacji. Momenty magnetyczne we wszystkich parach mieszanych oczywiście zniknęły, a w parach tego samego typu były zbliżone do 0.7-1.0 μ_B na jeden ren. Najkorzystniejsze energetycznie okazały się pary mieszane. Aby zachować magnetyzm należałoby całkowicie kontrolować proces domieszkowania tak by

powstawały konfiguracje geometryczne jednego typu. Na szczęście jest prostszy sposób, można domieszkować system dodatkowo elektronowo lub dziurowo a efekt magnetyzacji pozostanie.

Oprócz półprzewodników magnetycznych zajmowałam się innymi systememami, które wykazywały namagnesowanie, chociaż ich natura nie była stabilna – to monoatomowe nanodrutu metaliczne otrzymywane jako formy przejściowe w doświadczeniach na krótką skalę czasową. Można je stabilizować wewnątrz innych struktur w skali nano. Wspólny pokój w Trieście z Dr Anną Delin i praca pod kierunkiem Prof. Tosatti zaowocowały publikacją: *“Effect of electron correlations in Pd, Ni, and Co monowires”*. Nanodrutu metali przejściowych mogłyby stanowić część układów elektronicznych nie tylko ze względu na przewodnictwo elektryczne, ale również z powodu namagnesowania, które mogłoby stanowić element logiczny. W metalach przejściowych istotne są relacje między obsadzeniem elektronowym powłok typu s i d . Te relacje wpływają na magnetyzm i przewodnictwo. Ich opis teoretyczny jest trudny, gdyż dotyczy problemu wcześniej wspomnianych silnych korelacji elektronowych na zlokalizowanych orbitalach. Metody DFT+U czy DFT z poprawką na samoodziaływanie elektronu, tzw. pSIC, zaliczają się do metod z korelacjami statycznymi, ponieważ poprawki nie zależą od częstości Matsubary. W przeciwieństwie do metody z dynamicznymi korelacjami elektronowymi jaką jest podejście dynamicznego pola średniego (ang. DMFT), które jednak w swojej konstrukcji może załamywać się w układach jednowymiarowych. Po stażu w Dublinie i kilkutygodniowym pobycie w San Sebastian u jednego z głównych deweloperów kodu SIESTA, Daniela Sanchez-Portal, gdzie zaimplementowałam pierwszą wersję metody pSIC, zastosowałam ten kod oraz metody DFT+U i pSIC do problemu nanodrutów metali Pd, Co i Ni. Zebrane wyniki wskazują na lekkie podniesienie obsadzenia powłok typu s w tych systemach przy zastosowaniu metod z silnymi korelacjami. To prowadzi do znacznego obniżenia liczby kanałów transportowych, a więc powoduje redukcję przewodnictwa balistycznego. Obliczenia przy odległościach międzyatomowych otrzymanych dla minimum energii układu oraz dla dużo większych, w punkcie zerwania drutów, wskazują na wzrost magnetyzacji dla nanodrutu Pd i braku wpływu korelacji elektronowych na magnetyzację w nanodrutach Ni i Co. Przy systematycznym zwiększaniu siły oddziaływań w powłoce d , następuje postępująca redukcja liczby kanałów przewodnictwa. Jednak nawet przy zastosowaniu metody pSIC z poprawkami w powłokach s i d , zawsze pozostają pasma przewodnictwa typu s w obu spinach – które są szersze i wydajniejsze transportowo od pasm typu d (to dotyczy wszystkich badanych nanodrutów). Dla układów bardzo niskowymiarowych poprawka na samoodziaływanie jest za słaba i nie zależy ona od odległości międzyatomowych (potenjał Hartree i korelacyjno-wymienny zależą w niej od gęstości orbitalnych a nie gęstości całego układu, z odległością zmieniać mogą się tylko liczby obsadzeń). W metodzie DFT+U jest możliwość oszacowania parametru U dla danego układu przy różnych separacjach międzyatomowych – stosuje się do tego metodę zaburzeniową, polegającą na odpowiedzi liniowej obsadzeń orbitali Kohn-Sham przy zmianie parametru dodanego do równania na energię całkowitą z więzami. Policzylam parametr U dla wszystkich drutów w punkcie zrywania i przy bardzo dużej separacji atomów – co dało wynik zaskakująco wysoki i rosnący z odległością. Intuicyjnie tendencja ta nie jest zaskakująca, chociaż dziwić mogą trochę zbyt duże wartości parametru U . Jednak w tak niestabilnym przypadku jakim są nanodrutu metali przejściowych być może te odczucia nie są prawdziwe; należałoby to zweryfikować doświadczalnie.

- **Nadprzewodnictwo – wkłady elektronowe, fononowe i od fluktuacji spinowych, parametry dla modelu C_{60}**

Nadprzewodnictwo jest efektem modelowanym teoretycznie z użyciem wielu parametrów, przeważnie dobieranych do danych z doświadczenia. Pomimo paru sformułowań, w ramach metod *ab initio* właściwie nie ma jeszcze narzędzia, które pozwoliłoby na swobodne badanie nadprzewodników na tym samym poziomie jak magnetyki - mam na myśli metodę zupełnie wolną od parametrów parowania elektronów zadanych z góry. W ramach teorii funkcjonałów gęstości zostały położone podstawy dla opisu nadprzewodników poprzez dwa równania podobne do tych znanych Bogoliubov-de Gennes i zawierających zależność funkcjonału gęstości od gęstości elektronowej i anomalnej, czyli gęstości par – lub innymi słowami: poprzez równania zawierające zależność od potencjału jąder atomowych i potencjału parowania. Sformułowanie to zostało podane w publikacji Olivera, Gross i Kohn (OGK) w 1988 roku. Do dnia dzisiejszego nie sparametryzowano jeszcze funkcjonału korelacyjno-wymennego dla obu gęstości w nadprzewodnikach – tak jak to zostało zrobione dla gęstości spinowej przez Ceperley-Alder w rachunkach kwantowego Monte Carlo i kontynuowane przez wielu autorów np. metodą rachunku zaburzeń. Istnieją bardzo skomplikowane wzory dla funkcjonału korelacyjno-wymennego dla przypadku gazu jednorodnego – bazujące na przybliżeniu faz przypadkowych (ang. RPA). Inne wkłady do energii zawierają wyrazy pierwszego rzędu w rozwinięciu względem potencjału oddziaływania elektron-fonon lub elektron-magnon. Jedna próba podania postaci funkcjonału gęstości dla układu niejednorodnego została poczyniona w sposób fenomenologiczny przez Gyorffy, Temmermann i Szotek z parametrami dobranymi tak by odwzorować dane doświadczalne dla YBCO.

Podstawą metody DFT jest minimum energii całkowitej przy wariacji parametrów gęstości (przeważnie rozwiniętej w bazie fal płaskich lub funkcji zlokalizowanych). Chociaż różnice energii całkowitej dla różnych stanów układu czasami trudno jest zmierzyć, to energia całkowita jest bardzo wygodnym obiektem do teoretycznego porównywania faz materii, np. stanu magnetycznego, struktury krystalicznej czy reakcji chemicznych. Dla układów magnetycznych można policzyć energię całkowitą przy porządku ferromagnetycznym i antyferromagnetycznym lub paramagnetycznym i porównać je konkludując o stanie podstawowym. W przypadku nadprzewodników bardzo dogodnym obiektem jest energia kondensacji, tzn. różnica energii całkowitych przy niezerowym potencjale parowania i przy jego braku. W ten sposób można nie tylko stwierdzić jaki jest stan podstawowy, ale - co ciekawsze - jak głęboko w nadprzewodnictwie, lub jak daleko od nadprzewodnictwa jest układ, gdy włączamy do opisu kolejne oddziaływania: czysto elektronowe, fononowe, spinowe; i analizować przyczynki od tych oddziaływań w funkcji temperatury.

Kohn i Luttinger w publikacji z 1965 roku analizowali modelowo energię kondensacji gazu jednorodnego przy potencjale parowania ze zmiennymi parametrami amplitudy i symetrii (dla orbitalnych liczb kwantowych $l=0,1,2,3$). Zrobili to tylko dla modelowych oddziaływań korelacyjnych elektronów przy uwzględnieniu oscylacji Friedel'a. W naszych publikacjach z Jesper'em Krogh analizujemy energię kondensacji dla gazu jednorodnego trzymając się ściśle sformułowania teorii funkcjonałów gęstości dla nadprzewodników i perturbacyjnego przedstawienia oddziaływań elektronowych; sformułowania rozwiniętego przez doktorantów Profesora E.K.U. Gross'a.

W publikacji: *“The condensation energy of the homogeneous superconducting gas”*, zamieszczonej w Computer Physics Communications, oddaliśmy do użytku powszechnego program komputerowy CHS. Może on służyć jako narzędzie do parametryzacji funkcjonału korelacyjno-wymennego dla gazu niejednorodnego, opartej na danych zebranych dla

reprezentacyjnego zbioru parametrów ustalonych dla gazu jednorodnego o różnych gęstościach. Parametrem gęstości jest r_s , czyli promień elektronu swobodnego, a parametrami potencjału parowania są jego amplituda i orbitalna liczba kwantowa określająca symetrię w reprezentacji wielomianów Legendre'a. Oddziaływania dwuelektronowe zależą od dwóch wektorów i dwóch częstości Matsubary, czyli w sumie od ośmiu parametrów; z czego jedną częstość Matsubary – elektronową – można wycałkować w energii całkowitej analitycznie. Zatem pozostają nam całki siedmiowymiarowe. Policzenie takich całek jest numerycznie bardzo skomplikowane nie tylko ze względu na wielowymiarowość, ale przede wszystkim z powodu osobliwości poruszających się w przestrzeni konfiguracyjnej z wektorem oddziaływania między elektronami. Dokładnie, osobliwości te leżą na torusie wyznaczonym przez płaszczyznę prostopadłą do wektora oddziaływań i określonego przez wektory obu elektronów. W takim przypadku nie można stosować ustalonych siatek całkowania, za to świetnie sprawdza się metoda całkowania statystycznego Monte Carlo. Napisałam program komputerowy dla tych całek, w języku fortran, który działał seryjnie na jednym procesorze. Zebranie danych na reprezentacyjnym zbiorze statystycznym było niemożliwe. Poznanie Jespera Krogh, który nauczył mnie programowania równoległego w MPI i zrównoleglił mój kod, było kluczowym krokiem w tym projekcie, a z metody programowania korzystałam wielokrotnie w kolejnych tematach.

Podstawy teoretyczne i fizyczny obraz wynikający z zebranych danych dyskutowaliśmy w publikacji: *“Condensation energy of the homogeneous electron gas from density-functional theory for superconductors”*, zamieszczonej w Phys. Rev. B. Wykorzystaliśmy nasz program CHS do skompletowania wyników dla zbioru parametrów gęstości i potencjału parowania. Uwzględniliśmy dokładnie energię wymiany dla gęstości normalnej i anomalnej oraz energię korelacji elektronowych w przybliżeniu faz przypadkowych. Przedstawiłam diagramy Feynmann'a i porównałam teorię OGK z wcześniejszymi pracami Kohn-Luttinger z 1965 roku, Takada z 1978 roku i Rietschel-Sham z 1983 roku. Główna różnica między naszymi diagramami a wcześniejszymi wynika z faktu, że uwzględniliśmy wszystkie najniższe wkłady od wyrazów z funkcjami Green'a dla gęstości anomalnej (F) i normalnej (G). Jest to istotne, gdyż gęstość normalna w nadprzewodnikach również zawiera potencjał parowania i wkład tych wyrazów do energii jest tego samego rzędu wielkości co wkład od wyrazów z gęstością anomalną. Obie energie wymiany i energia kinetyczna są zawsze dodatnie, natomiast energia korelacji jest ujemna – ważne jest dla nas czy ona może przebić dodatnie wkłady dla pewnego zestawu parametrów, czy można otrzymać nadprzewodnictwo z oddziaływań czysto elektronowych. Wiadomo bowiem, że w nadprzewodnikach wysokotemperaturowych temperatura krytyczna rośnie z liczbą węzłów w przerwie energetycznej. W naszych rozważaniach założyliśmy parowanie singletowe, ale dla trypletowego można przeprowadzić analogiczne rozważania – nie ma tego typu ograniczeń w modelu. Są natomiast ograniczenia ze względu na brak uwzględnienia silnych korelacji elektronowych w układzie. Można te poprawki wprowadzić albo na poziomie DFT+U albo DFT+DMFT. Nasze wyniki pokazują, że energia kondensacji jest prawie wszędzie dodatnia w przestrzeni konfiguracyjnej i maleje z orbitalną liczbą kwantową l – tak jak się spodziewaliśmy. Szczególnie interesujące są lekko ujemne wartości energii kondensacji dla parowania o symetrii f i bardzo małych gęstości ($r_s=10$, $l=3$).

Publikacja: *“Condensation energy and T_c within the density functional theory for superconductors”*, zamieszczona w AIP Conference Proceedings ze szkoły letniej w Vietri Sul Mare, poświęconej nadprzewodnictwu i układom silnie skorelowanym, jest kompilacją publikacji o energii kondensacji dla gazu jednorodnego i wyników zebranych dla Nb pod ciśnieniem z uwzględnieniem oddziaływań elektron-fonon wchodzących do modelu temperatury krytycznej w ramach sformułowania teorii funkcjonałów gęstości dla nadprzewodników. Przedstawiłam, podczas tej szkoły, referat wprowadzający do sformułowania DFT dla nadprzewodnictwa i

pokazałam przykłady. W metodzie na określenie temperatury krytycznej wykorzystuje się tzw. przybliżenie „odsprężenia” (ang. decoupling approximation), w którym równania Bogoliubov-de Gennes są sprowadzone do równania Kohn-Sham z funkcjonałem gęstości zależnym od dwóch potencjałów (jąder atomowych i parowania elektronów) oraz równania na przerwę energetyczną wynikającą ze stanu nadprzewodzącego (ang. gap equation). To równanie na przerwę jest następnie linearyzowane, a temperatura krytyczna to taka w której przerwa znika. Jak widać odnosi się to do klasycznych nadprzewodników; założenie to nie uwzględnia pseudoprzerwy, jednak ogólnie w DFT dla nadprzewodników nie ma takiego ograniczenia. Zaimplementowałam te równania, i otrzymałam wyniki z uwzględnieniem widma elektron-fonon poprzez funkcję Eliashberga – policzoną programem Quantum ESPRESSO, używając metodę odpowiedzi liniowej potencjału Kohn-Sham w funkcji przesunięcia atomów. Usprawniłam sposób liczenia sprzężenia elektron-fonon – co opisuję w kolejnej publikacji. Temperatury krytyczne uzyskane z fenomenologicznej formuły McMillan lub Allen-Dynes mniej więcej pasują do doświadczalnych w warunkach atmosferycznych, ale wykresu przy zmianie ciśnienia w materiale nie można już odtworzyć w ten prosty sposób. Udało się to zrobić stosując DFT dla nadprzewodników z pełną funkcją Eliashberga, zamiast prostej stałej elektron-fonon stosowanej we wzorze fenomenologicznym.

Sprężenia elektron-fonon (el-f) daje jeśli nie kluczowy to bardzo istotny wkład w zjawisko nadprzewodnictwa, jego uwzględnienie jest też nieodzowne w innych zjawiskach transportowych. W pakiecie Quantum ESPRESSO, do policzenia sprzężenia el-f służy program PHONON, a dokładne rachunki są bardzo czasochłonne ze względu na konieczność całkowania numerycznego w przestrzeni trójwymiarowej po zmiennych elektronowych i fononowych co daje wymiar 6. Dodatkowo całki sprzężenia el-f zawierają podwójną deltę Dirac’a wokół energii Fermiego. Ponieważ powierzchnia Fermiego dla każdego materiału bardzo się różni, nie można zagęścić siatki w wybranej części strefy Brillouina – siatki numeryczne muszą być gęste w całej przestrzeni. Do tego celu dopisałam procedury liniowej interpolacji elementów macierzowych sprzężenia el-f w całej strefie Brillouina (ang. BZ) dla zmiennych elektronowych. Skorzystałam z operacji symetrii kryształu zastosowanych na danych zebranych w części nieprzywiedlnej BZ. Drugą całkę po zmiennych fononowych interpolujemy z użyciem podwójnej transformaty Fouriera. W ten sposób znacznie skrócił się czas rachunków sprzężenia el-f. Fonony i macierz dynamiczna jak i elementy macierzowe sprzężenia el-f są liczone z metody odpowiedzi liniowej potencjału Kohn-Sham na zmianę współrzędnych atomowych (ang. DFTPT). Usprawniony pakiet przetestowałam na zmianach stałej sprzężenia el-f i temperatury krytycznej dla nadprzewodnictwa w Nb pod ciśnieniem. W ten sposób powstało wspólne opracowanie ze Stefano de Gironcoli i Paolo Giannozzi: *“Origins of low- and high-pressure discontinuities of T_c in niobium”*. Zauważyliśmy, że nagły spadek sprzężenia el-f i temperatury krytycznej w pobliżu ciśnienia atmosferycznego oraz powolny ciągły spadek pod ciśnieniem wiążą się z „zagnieżdżeniem” (ang. nesting) pasm elektronowych w okolicy powierzchni Fermiego. Praca została wysłana do Phys. Rev. B a recenzent uznał, że nie można bezpośrednio wiązać nesting’u ze sprzężeniem elektron-fonon – z tej przyczyny opracowanie pozostało tylko na ARXIV. Ponieważ usprawniona metoda numeryczna jest opisana w tej pracy i stanowi część oficjalnego kodu, wykorzystywanego przez użytkowników Quantum ESPRESSO, wiele cytowań odnosi się do tego opracowania.

Oprócz oddziaływań czysto elektronowych i elektronowo-fononowych, jednym z najistotniejszych elementów nadprzewodnictwa są fluktuacje spinowe. Fluktuacje spinowe podłużne podnoszą temperaturę krytyczną a poprzeczne (paramagnony) ją obniżają. Dlatego zajęłam się wyprowadzeniem wzorów na wkłady od paramagnonów do sformułowania DFT dla nadprzewodników oraz implementacją tych wzorów do własnego kodu na temperaturę krytyczną i przetestowaniem nowych narzędzi dla prostych metali. Powstała publikacja: *“Effect of spin*

fluctuations on T_c from density-functional theory for superconductors". W celu podania detali matematycznych, nieodzowne było dokładne przedyskutowanie implementacji fononów do DFT dla nadprzewodników. Następnie wprowadziłam fluktuacje spinowe. Funkcja Green-Nambu jest w tym przypadku czterowymiarowa, tak samo jak macierz energii własnej. W przypadku paramagnonów, spinowo-fluktuacyjna funkcja Green'a jest funkcją poprzeczną podatności magnetycznej, a w węzłach oddziaływania jest stała wymiany elektron-paramagnon I_{ex} uśredniona po wektorach oddziaływania q . Poprzez analogię do fononowej funkcji spektralnej, tzw. funkcji Eliashberga, funkcja spektralna paramagnonów jest również zależna od częstości (energii oddziaływania), ale do jej otrzymania stosujemy przybliżenie faz przypadkowych i uśrednienie po przestrzeni momentów. Zatem nie jest to w pełni podejście *ab initio* – z fluktuacjami policzonymi tak jak fonony, ze zmiany potencjału Kohn-Sham w odpowiedzi na zaburzenie – tylko podejście mieszane, z modelową zależnością od częstości i materiałowo zależnymi stałymi wymiany. Wyprowadziłam równanie na przerwę energetyczną w nadprzewodnikach z wkładem od funkcji spektralnej paramagnonów. Policzyłam obie funkcje spektralne, fononową i paramagnonową, otrzymałam temperatury krytyczne na nadprzewodnictwo dla kilku metali prostych: Ta, Mo, V, Pd-fcc i Pd-bcc przy równowagowej stałej sieci krystalicznej i zależność parametrów dla Nb pod ciśnieniem. Porównałam temperatury krytyczne otrzymane z równania na przerwę energetyczną w modelu Eliashberga i DFT dla nadprzewodników, z oddziaływaniami fononowymi i z uwzględnieniem paramagnonów – fluktuacje znacznie przybliżają wynik do doświadczenia i teoria OGK też wypada znacznie lepiej od modelu Eliashberga. Należy dodać, że wcześniej tego typu rachunki materiałowe zostały przeprowadzone w ramach modelu Eliashberga przez Chubukova, również dla energii kondensacji. Wraz z przeniesiem uwagi w środowisku teoretyków nadprzewodnictwa na efekty wynikające z silnych korelacji elektronowych oraz DFT+DMFT, powiększyła się liczba trudnych tematów do rozwiązania i zainteresowanie rozwojem DFT dla nadprzewodników na chwilę ustało. Jednak mam nadzieję, że powróci, ponieważ w historii fizyki metody *ab initio* – z powodu skali trudności – zawsze rozwijały się kilka kroków za modelami.

Wspomniane silne korelacje elektronowe, tak charakterystyczne dla nadprzewodników, są tematem naszej wspólnej publikacji z Martinem Lueders i Erio Tosatti: "**Multiplet structures of charged fullerenes**". Fulleren C_{60} domieszkowany dziurowo jest nadprzewodnikiem jako kryształ molekularny w sieci bcc. Jako cząsteczka, C_{60} ma pięciokrotnie zdegenerowane orbitale najwyżej obsadzone (ang. HOMO) i trzykrotnie zdegenerowane orbitale najniżej nieobsadzone (ang. LUMO). Przy domieszkowaniu, w układzie tym współzawodniczą zasadą wymiany Hund'a i efekty Jahn-Teller, co prowadzi do skomplikowanych diagramów fazowych. Dlatego tak ważne jest dobre wyznaczenie parametrów Coulomb'a U i wymiany J dla modelu Hubbarda i teorii DMFT. Wcześniejsze prace dla C_{60} w grupie z Triestu wykorzystywały program Quantum ESPRESSO dla DFT w ujęciu periodycznym w bazie fal płaskich. DFT dla kryształów nie jest w stanie dobrze odtworzyć energii wzbudzeń w cząsteczkach. Słyszając dyskusje na temat multipletów w C_{60} zaproponowałam metodę CAS SCF i program GAMESS, który wykorzystywałam podczas doktoratu. DFT bazuje tylko na gęstości elektronowej, natomiast do wyznaczenia energii multipletów potrzebne są wszystkie wzbudzenia elektronowe w ramach kilku orbitali zdegenerowanych. Takie energie mogą być otrzymane tylko z kombinacji wyznaczników Slater'a z dokładną energią wymiany. Metoda CAS SCF (ang. complete active space self-consistent field) zawiera wszystkie konfiguracje elektronowe w ograniczonej przestrzeni zatem jest metodą z korelacjami statycznymi, w przeciwieństwie do metod zaburzeniowych uwzględniających korelacje dynamiczne. W przypadku jonów dodatnich, przestrzeń aktywną stanowiło pięć orbitali HOMO, a w przypadku jonów ujemnych trzy orbitale LUMO. Wszystkie energie multipletów zostały policzone w geometrii układu neutralnego (zamkniętopowłokowego). Jonizacja układu powoduje nie tylko zmianę orbitali zdegenerowanych HOMO i LUMO ale również relaksację głębszych powłok elektronowych. Takie efekty można uwzględnić tylko biorąc

jako stan referencyjny rozwiązanie z metody uwzględniającej korelacje dynamiczne. Dlatego naszą metodą wyjściową do CAS SCF było ROMP2 (ang. restricted open-shell Moeller-Plesset perturbation theory of 2nd order). Sprawdziliśmy również wpływ uwzględnienia pięciu głębszych orbitali HOMO-1 i trzech wyższych orbitali LUMO+1, ale efekty te były zanedbywalnie małe. Ponieważ program GAMESS nie wykorzystuje symetrii ikosaedru, stosowaliśmy symetrie D5 i D3 w obliczeniach, jednak długości wiązań i kąty w układzie posiadały pełną symetrię ikosaedru. Parametr Coulomb'owski U został wyznaczony dla jonów na dwa sposoby: z energii całkowitych dla stanu podstawowego i z uśrednionych energii multipletów. Natomiast parametr wymiany Hund'a został wyznaczony z multipletów policzonych dla zjonizowanych przypadków. Nasze wyniki zostały porównane z danymi otrzymanymi w ramach DFT, z metod półempirycznych i z innych metod chemii kwantowej – tam gdzie takie dane istniały. Potencjały jonizacyjne zostały porównane również z danymi spektroskopowymi. Nasze parametry zostały już zacytowane w publikacjach wykorzystujących metodę DMFT (Millis, Werner, Siegrist).

• Grafen

Po zatrudnieniu w Warszawie w projekcie SiCMAT (<http://sicmat.materials.pl/>), głównym tematem badań stał się grafen na powierzchni węgla krzemu. Spowodowane to było współpracą z ITME, w którym wytwarza się płyty grafenu bardzo wysokiej jakości; w wysokiej temperaturze i w atmosferze argonu w procesie chemicznego osadzania w próżni (ang. chemical vapor deposition, CVD). W roli prekursora węglowego używa się propan, tj. C_3H_8 . Interesujące jest jak te składniki uczestniczą w procesie tworzenia grafenu na SiC, w jaki sposób następuje dehydratacja warstwy i jaka jest rola argonu. Wspólnie z Adamem Dominiakiem i Kamilem Tokar'em przeprowadziliśmy obliczenia, które zaowocowały publikacją: *“CVD formation of graphene on SiC surface in argon atmosphere”*. Argon jako gaz szlachetny w stanie podstawowym nie wiąże się chemicznie, tworzy tylko kompleksy Van der Waalsa. Natomiast w stanie wzbudzone do trypletu, argon tworzy kilka cząsteczek: $HArF$, $HArCl$, $FArCCH$, $FArSiF_3$. Zjonizowane gazy szlachetne tworzą kompleksy z wodorem; znane są: ArH^+ , HeH^+ , NeH^+ , KrH^+ , XeH^+ . Dodatkowo, w pomiarach Ramana zaobserwowano, że po epitaksji grafenu powierzchnia SiC gromadzi ładunek ujemny. Zadaliśmy sobie pytanie czy argon uczestniczy w reakcjach chemicznych z protonem. Przeprowadziliśmy obliczenia kwantowo-chemiczne dla molekuł, programem GAMESS, używając metod Hartree-Fock, MP2 i DFT. Skoncentrowaliśmy się na reakcjach kolejnych deprotonizacji propanu i jego kolejnych odwodornionych form, oraz na reakcji rozpadu cząsteczki ArH^+ . Następnie przy pomocy pakietu Quantum ESPRESSO, przeprowadziliśmy szereg obliczeń metodą DFT dla powierzchni $4H$ -SiC(0001) (dla heksagonalnej formy SiC w ułożeniu co 4 warstwy) z wodorem, propanem i wszystkimi formami przejściowymi propanu po odrzuceniu kolejnych wodorów lub protonów – dla form neutralnych ładunkowo lub zjonizowanych ujemnie. Policzyliśmy bariery na dehydratację metodą ścieżek o najniższej energii całkowitej (ang. climbing-image nudged-elastic-band method, NEB) i określiliśmy efekt katalityczny powierzchni dla reakcji w obie strony (osadzania lub desorpcji). Wnioskiem z porównania energii na te reakcje jest stwierdzenie, że w niskiej temperaturze nie zachodzi reakcja deprotonizacji z udziałem argonu. Kamil Tokar przeprowadził również pilotażowe rachunki metodą dynamiki molekularnej (MD) w temperaturze 1500 K dla cząsteczek propanu na SiC, bez atmosfery argonu, aby potwierdzić efekt katalityczny powierzchni; użył do tego program SIESTA. W obu doświadczeniach numerycznych, NEB i MD, wodory po odłączeniu się od węglowodorów osiadały na powierzchni SiC, w pobliżu zaadsorbowanych grup C_3H_x ($x=8, \dots, 0$). Zatem w naszych symulacjach powierzchnia SiC pozostawała zawsze częściowo „zatruta” wodorami, co uniemożliwiałoby całkowite pokrycie jej czystą warstwą grafenu. Należy dodać, że studiowaliśmy SiC zakończone krzemem a nie węglem. W doświadczeniu rzeczywiście

grafenu na tej powierzchni rośnie w postaci monowarstwy z różnymi odległościami między węglami a SiC, co wskazywałoby na scenariusz z wyspami wodoru pomiędzy SiC a grafenem.

Grafen jako metal w jednym punkcie k w BZ, zwanym punktem Dirac'a nie może być użyty w elementach elektronicznych jako półprzewodnik. Dlatego ważna jest jego funkcjonalizacja i otwarcie przerwy energetycznej. Można to zrobić domieszkując ten materiał na przykład borem lub azotem. Ze względu na wyjątkowe własności elastyczne grafenu, istotnym pytaniem jest to czy po domieszkowaniu te własności zostaną zachowane. Karolina Milowska i Magdalena Wońska postawiły sobie ten problem, następnie z użyciem programu SIESTA przeprowadziły wszystkie obliczenia i napisały pierwszą wersję publikacji. Nie mając jeszcze stopnia doktora, zwróciły się do mnie o korektę tekstu angielskiego i wzięcie na siebie funkcji autora korespondencyjnego w J. Phys. Chem. C.

Obecnie pracujemy nad manuskryptami dwóch kolejnych prac o grafenie na węglu krzemu: M. Wierzbowska, Adam Dominiak i Giovanni Pizzi: *“Effect of C-face 4H-SiC(0001) deposition on thermopower of single and multilayer graphene in AA, AB and ABC stacking”* oraz *“Longitudinal spin-Seebeck effect in graphene doped with H or F, free-standing and deposited on C-face 4H-SiC(0001); huge growth of thermopower and thermoelectric efficiency (ZT) at the band edges”*. Tematy zostały zaprezentowane na konferencji MRS Fall Meeting, Warszawa 2013 – dla grafenu czystego, domieszkowanego i wielowarstw bez podłoża. Po konferencji doliczyłam efekt podłoża SiC i spisałam wyniki, a manuskrypty są w tej chwili w rękach współautorów. Interesującymi wnioskami z tych prac są fakty: 1) wzmocnienie efektu Seebecka, gdy grafen jest osadzony na SiC, 2) ułożenia AB i ABC są termoelektrycznie korzystniejsze od AA, ze względu na mniejsze siły Van der Waalsa pomiędzy warstwami, 3) domieszkowanie grafenu H i F powoduje efekt Seebecka z przeciwnymi znakami dla elektronów o przeciwnych spinach w tych magnetycznych układach. Najciekawsze są efekty “krawędziowe” lub “przerwowowe” na granicy pasm i przerw energetycznych, przy których wzmocnienie efektów termoelektrycznych jest gigantyczne. W przygotowanych manuskryptach wykorzystaliśmy równania Boltzmanna zaimplementowane na dokładnej interpolacji pasm poprzez użycie maksymalnie zlokalizowanych funkcji Wannier (ang. MLWF); Giovanni jest współautorem tego kodu. To umożliwiło szybkie policzenie parametrów termoelektrycznych na siatkach z 2500 punktów w każdym z dwóch kierunków w strefie Brillouin’a.

• Wkład w rozwój metod obliczeniowych i programów komputerowych

W czasie doktoratu dopisywałam kilka funkcji do kodów: pole ładunków punktowych, w celu symulacji powierzchni, do pakietu GAMESS i metodę UHF (ang. unrestricted Hartree-Fock) do programu Prof. Staemmler’a.

Moja pierwsza praca na stażu podoktorskim była w Lund, w grupie deweloperskiej programu MOLCAS. W tym czasie planowano rozwijać metodę o dokładności CAS PT2 i szybkości metody DFT. To miało być DFT dla stanów otwartopowłokowych – opublikowano tą metodę w ogólnym zarysie, z pierwszymi przykładami, kilka lat po moim stażu. Moim zadaniem było pomaganie w zaimplementowaniu DFT do tego dużego pakietu kodów dla chemii kwantowej. Wcześniej nie byłam nawet użytkownikiem tych programów, a moje doświadczenie z fortranem nie pozwalało szybko wykonać zadania. Prof. Roland Lindh nauczył mnie w tamtym czasie bardzo wiele, pokazał jak dopisać nową funkcję do istniejącego pakietu i praktycznie napisał wszystko sam, a ja tylko patrzyłam i testowałam nowe części programu poprawiając małe błędy – tzw. debugging.

Doświadczenie przy pakiecie MOLCAS pomogło mi w dalszej pracy samodzielnie zaimplementować nowe metody do pakietów SIESTA i Quantum ESPRESSO.

W trakcie pracy z programem MOLCAS w Lund, przeprowadziłam wstępne obliczenia dysocjacji cząsteczek CH_3X , $\text{X}=\text{Cl}$, Br , I , z uwzględnieniem sprzężenia spin-orbita, które znosi reguły wyboru zabraniające przejściom ze zmianą multipletowości spinowej. W efekcie cząsteczki dysocjowały do dwóch kanałów spinowych rozszczepionych proporcjonalnie do siły sprzężenia spin-orbita. Dalsze wnikliwe rachunki przeprowadziła Dr Ajitha z Dr Malmqvist i Prof. Lindh – powstała publikacja: *“Spin-orbit ab initio study of alkyl halide dissociation via electronic curve crossing”*.

Napisałam wersję seryjną programu CHS do liczenia wkładów do energii kondensacji dla stanu nadprzewodzącego w przybliżeniu gazu jednorodnego. Dr Jesper Krogh (który wówczas był doktorantem w Lund) przepisał ten kod do wersji równoległej i nauczył mnie używać fortran MPI, co w przyszłości posłużyło mi do dalszych implementacji. Program CHS służy do parametryzacji funkcjonałów korelacyjno-wymiennych dla nadprzewodników w ramach teorii funkcjonałów gęstości. Został też wykorzystany do porównania teorii OGK z wcześniejszymi pracami Kohn-Luttinger, Rietschel-Sham i Takada. Opisałam to szerzej w dziale „Nadprzewodnictwo”. Wiąże się z nim publikacje numer: 1, 5, 6 i 7 z listy po doktoracie.

W teorii OGK (DFT dla nadprzewodników) można zastosować przybliżenie odsprężenia zmiennych dla fazy normalnej od zmiennych opisujących pary Cooper’a. W efekcie jedno równanie jest zwykłym równaniem Kohn-Sham, a drugie równanie opisuje przerwę energetyczną w stanie nadprzewodzącym – można to równanie zlinearyzować i oszacować temperaturę krytyczną z warunku znikania przerwy. Takie równanie zawiera przyczynki od energii wymiany dla gęstości normalnej i anomalnej, energii korelacji, energii sprzężenia elektron-fonon, energii fluktuacji spinowych. Zaprogramowałam te przyczynki do własnego kodu na Tc i wykorzystałam w publikacjach 5 i 7 z listy po doktoracie.

Wyprowadziłam wzory na wkład fluktuacji spinowych (paramagnetycznych) do energii całkowitej i potencjału parowania w ramach DFT dla nadprzewodników. Szczegóły opisałam w dziale „Nadprzewodnictwo”, a dotyczą one publikacji o numerze 7 z listy po doktoracie. Nowe przyczynki zaimplementowałam do kodu na przerwę energetyczną i temperaturę krytyczną.

Policzenie sprzężenia elektron-fonon wymaga bardzo dokładnych całek numerycznych w przestrzeni 6-wymiarowej z podwójnymi funkcjami delty Dirac’a w pobliżu powierzchni Fermiego. Dlatego usprawniłam kod PHONON w pakiecie Quantum ESPRESSO – co opisuję w dziale „Nadprzewodnictwo”. Wyniki i opis nowego sposobu przedstawiłam w opracowaniu 9, jak również korzystałam z tej części pakietu w publikacjach 5 i 7 z listy po doktoracie.

Zaimplementowałam metodę LDA+U i pierwszą wersję poprawki na samoodziaływanie w ramach pseudopotencjałów (pSIC) do pakietu SIESTA. Detale implementacji i wyniki z użyciem metody LDA+U dla półprzewodników magnetycznych są opublikowane w pracy o numerze 4 z listy po doktoracie oraz opisane w dziale „Półprzewodniki magnetyczne”. Implementację pSIC w pakiecie SIESTA wykorzystałam w publikacji o numerze 8 z listy po doktoracie i opisałam jako przykład opracowania o nanomagnetyzmie w dziale „Półprzewodniki magnetyczne i nanomagnetyzm”. W publikacji tej na zakończenie opisałam metodę wyznaczania parametru U z pierwszych zasad, z odpowiedzi liniowej liczb obsadzeń na zaburzenie dodane do równania Kohn-Sham. Jest to bardzo przydatna metoda, gdyż otrzymany parametr U jest dopasowany do konkretnego materiału w danej geometrii, przy użytych pseudopotencjałach i innych parametrach, które nie powinny się zmienić gdy stosujemy obliczone U w rachunkach. Najistotniejsze bowiem

w metodzie LDA+U jest nie samo U, tylko iloczyn U i liczb obsadzeń orbitalnych. Sama zależność parametru U, otrzymanego z tej metody, od geometrii układu jest już interesująca, szczególnie dla układów niskowymiarowych. Zaimplementowałam tą metodę w pakiecie SIESTA, do użytku własnego.

Uwzględnienie poprawek do metody DFT na silne korelacje elektronowe w układach z orbitalami zlokalizowanymi, w systemach niskowymiarowych, oraz na samoodziaływanie, jest często nieodzowne do postawienia właściwych wniosków fizycznych. Metoda pSIC jest niezależna od parametrów, w przeciwieństwie do DFT+U. Jest to o wiele prostsza rachunkowo metoda od dokładnej wymiany (ang. exact exchange, EXX). Ale nie tylko względy ekonomiczne przemawiają na jej korzyść. pSIC jest wewnętrznie związana z funkcjonalem korelacyjno-wymiennym. Natomiast w metodzie EXX usunięcie wymiany z funkcjonu gęstości i całkowite zastąpienie jej poprzez dokładną wymianę jest niedopasowane do funkcjonu korelacyjnego. Często wyniki z metody EXX dla kryształów dają przesadzone przerwy energetyczne, tak samo jak metoda Hartree-Fock w cząsteczkach daje zbyt duże odstępny HOMO-LUMO. Metoda pSIC wprowadza poprawkę na samoodziaływanie do wszystkich orbitali atomowych i wszystkich atomów w badanych układach. Postać poprawki jest stosunkowo prosta – to jest potencjał korelacyjno-wymienny i Hartree na gęstości orbitalnej z pseudopotencjału atomowego. Dlatego zaimplementowałam metodę pSIC również w pakiecie Quantum ESPRESSO. Całą implementację metody pSIC wykonałam przed rozpoczęciem pracy na FUW, a wyniki porównywalimy z Dr Andrzejem Fleszarem, który w tym samym czasie programował te same równania w swoim kodzie z bazą mieszaną. W publikacji o numerze 13 z listy po doktoracie, poprawka pSIC okazała się nieodzowna i niezastąpiona przez DFT+U.

Wyprowadziłam wzory na siły międzyatomowe w ramach DFT+pSIC i okazało się, po porównaniu do wcześniejszej opublikowanych przez Alessio Filippetti et al., że brakuje tam paru wyrazów proporcjonalnych do pochodnych z liczb obsadzeń. Zaimplementowałam wyprowadzone wzory na siły do pakietu Quantum ESPRESSO. W pakiecie tym są dwa typy pseudopotencjałów (ang. PP) : zachowujących normę (ang. norm conserving, NC) i ultramiękkich (ang. ultrasoft PP typu Vanderbilt) – te ostatnie wymagają zawsze kilku dodatkowych wyrazów w każdej implementacji, ze względu na wyrównanie do unormowania dla gęstości elektronowej. Następnie przetestowałam te wzory w module dla optymalizacji geometrii. Wyniki zebrałam dla kryształów: ZnO, CeO₂, perowskitów w strukturze P_{nma} (20 atomów w komórce elementarnej z dystorsjami Jahn-Teller) LaTiO₃, YTiO₃, LaMnO₃, oraz półprzewodników magnetycznych Si:Mn i Si:Re z dwiema domieszkami w komórce elementarnej. Implementacja zawiera również poprawki gradientowe w metodzie GGA, w części samego pSIC jak i optymalizacji geometrii metodą minimalizacji wartości bezwzględnych sił (co jest równoważne minimalizacji energii). Sama dobrałam przykłady i na koniec spisałam publikację: *“Forces and atomic relaxation in density functional theory with the pseudopotential self-interaction correction”* oraz poprosiłam Profesora Majewskiego o korektę i uwagi, jako osobę doświadczoną z inną wersją metody z samoodziaływaniem. W dalszej pracy wykorzystywałam metodę pSIC z pakietu Quantum ESPRESSO w publikacjach o numerach 13 i 16 z listy po doktoracie.

Podczas mojego stażu podoktorskiego w Trieście, równolegle na MIT był rozwijany program wannier90 dla maksymalnie zlokalizowanych funkcji Wannier (ang. MLWF). Program ten wykorzystuje na starcie dane o kryształach i zoptymalizowane w ramach samouzgodnionej metody DFT wektory Hamiltonianu, czyli funkcje Bloch’a. Byłam zaangażowana w pisanie przejścia z Quantum ESPRESSO do wannier90, nazywanego pw2wannier – informacja o tym jest w historii kodu na stronie www.wannier.org Następnie wykorzystywałam ten kod w publikacji 16 z listy po doktoracie i w przygotowywanych manuskryptach o efektach termoelektrycznych w czystym

grafenie, wielowarstwach grafenu i domieszkowanym grafenie na SiC. Wiążę z kodami postwannierowymi przyszłość w kolejnych planowanych projektach.

Tematy w realizacji

Interpolacja funkcjami MLWF pasm energetycznych i elementów macierzowych Hamiltonianu pozwala szybko policzyć szereg ciekawych i skomplikowanych obserwacji określonych poprzez rozwiązania metody DFT. Jednym z nich jest anomalne przewodnictwo Hall'a, które zainteresowało mnie w odniesieniu do cienkich warstw (Ga,Mn)As. Zaprezentowałam wyniki dla małych komórek elementarnych, aż do wielkości 64-atomów, na konferencji MRS Fall Meeting, Warszawa 2013. Dla dużych komórek, w których można zdefiniować warstwy 2-wymiarowe o różnych rekonstrukcjach powierzchniowych, potrzeba większych mocy obliczeniowych i dalszego rozwoju kodów.

Drugą ciekawą klasą materiałów są dwuwymiarowe półprzewodniki metalo-organiczne, posiadające szereg własności pożądaných dla przyszłościowych materiałów elektronicznych, spintronicznych i opto-elektronicznych.

Małgorzata Wierzbowska