

Jacek A. Majewski

+48-22-5532924; jacek.majewski@fuw.edu.pl

ul. L. Pasteura 5, 02-093 Warszawa

Warszawa, 5 sierpnia 2022r

Recenzja pracy doktorskiej pani mgr Pamelii Kowalewskiej

Rozprawa doktorska pani mgr **Pamelii Kowalewskiej** zatytułowana **“Teoretyczne badania własności nanomagnetyków kwantowych metodą dokładnej diagonalizacji”** przedstawia ściśle wyniki teoretycznych obliczeń własności termodynamicznych skończonych układów spinów zakładając, że układ spinów opisany jest hamiltonianem Heisenberga z zewnętrznym polem magnetycznym. Wielkość badanych układów pozwala na ścisłą diagonalizację macierzy hamiltonianu. W *Rozprawie* przedstawiono wyniki obliczeń dla układów spinowych realizowanych doświadczalnie: (i) sześciu dimerów uporządkowanych w formie drabinki, oraz (ii) szeregu spinów uporządkowanych w formie występującej w magnetykach molekularnych V6 i Cu5. *Rozprawa* stanowi interesujące studium ściśle rozwiązywalnych modeli, w pewnych przypadkach nawet analitycznie, które mogą się przyczynić do lepszego zrozumienia fizyki w eksperymentalnie realizowanych układach. Wyniki prezentowane w *Rozprawie* zostały częściowo opublikowane w szeregu publikacji autorki *Rozprawy* i jej promotora.

Rozprawa mgr Pamelii Kowalewskiej składa się zasadniczo z pięciu rozdziałów, dość obszernej bibliografii, oraz uzupełnień w postaci spisu rysunków i używanych w pracy symboli. W rozdziale 1 przedstawiono model teoretyczny. Zdefiniowano hamiltonian a następnie wyprowadzono dla tego hamiltonianu, w ramach zespołu kanonicznego, podstawowe wielkości termodynamiczne zarówno dla skończonej temperatury, jak również wyrażenia dla wielkości termodynamicznych w granicy zerowej temperatury. W ostatnich podrozdziałach przedstawiono termodynamiczny opis zjawiska magnetokalorycznego oraz model Schottky’ego, gdzie stan termodynamiczny układu opisany jest w przybliżeniu uwzględniającym tylko dwa najniższe stany energetyczne układu. Chciałbym podkreślić, że wszystkie wyprowadzenia są niezwykle dokładnie

przeprowadzone i cały rozdział może stanowić znakomity „tutorial” dla nowych adeptów fizyki teoretycznej.

W rozdziale 2 *Rozprawy* przedstawiono krótki opis eksperymentalnie realizowanych nanomagnatów, a w przypadku modelowanych układów spinów przedstawiono również wyspecjalizowany do tych przypadków hamiltonian zdefiniowany w rozdziale 1, ze wskazaniem oddziaływań pomiędzy spinami, które determinują fizyczne własności układu.

Zasadniczy opis uzyskanych wyników zawierają rozdziały 3 i 4, odpowiednio dla dwunastu spinowej drabinki, oraz nanomagnetyków molekularnych V_6 i Cu_5 . W obu rozdziałach analiza uzyskanych wyników została przedstawiona w sposób niezwykle szczegółowy. Dużo miejsca poświęcono przedstawieniu zależności obliczonych własności termodynamicznych układu, również odpowiednich diagramów fazowych, od parametrów hamiltonianu definiujących siłę oddziaływań. W przypadku w miarę prostych układów spinowych reprezentujących magnetyki molekularne V_6 i Cu_5 przedstawiono szczegółowo ścieżkę prowadzącą do analitycznych rozwiązań. Rozdział 5 stanowi zwięzłe podsumowanie pracy.

Rozprawa napisana w języku polskim, jest bardzo starannie zredagowana, zawiera bardzo dobre ilustracje i bogatą bibliografię. Na końcu pracy doktorskiej została umieszczona lista używanych skrótów oraz spis 61 rysunków. Liczba literówek jest niezwykle mała; na przykład: „j” zamiast „i” ideksujące m we wzorze (1.90); „j” w S_{jB} zamiast „i” w członie hamiltonianu wyrażonego wzorem (2.1) proporcjonalnego do J_2 . Opis uzyskanych wyników jest wyczerpujący i zrozumiały, co powoduje, że śledzenie toku rozumowania Doktorantki nie przedstawia najmniejszych trudności.

Generalnie uważam, że Doktorantka opanowała bardzo dobrze techniki obliczeń w ramach formalizmu mechaniki kwantowej i jest w stanie przedstawić dojrzały teoretycznie opis szerokiego zakresu zjawisk spinowych obserwowanych doświadczalnie. Największym atutem *Rozprawy*, zdaniem recenzenta, jest przedstawienie ścisłych rozwiązań dla modelowego hamiltonianu opisującego układ oddziałujących spinów. Pozwala to na lepsze zrozumienie roli oddziaływań pomiędzy parami spinów i ich wpływu na termodynamiczne własności układu. Ponieważ bardzo często wyniki ilościowych obliczeń numerycznych są odwzorowywane na wyniki uzyskane dla prostych efektywnych (modelowych) hamiltonianów, niniejsza *Rozprawa* wskazuje ścieżkę postępowania w przypadku nanomagnetyków.

Rezultaty prezentowane w *Rozprawie* zostały otrzymane dla względnie małej liczby spinów (maksymalna rozważana liczba spinów równa 12). Ponieważ obecnie dostępne technologie informacyjne pozwalałyby na ścisłą diagonalizację dużo większych układów spinowych, istnieje opcja przyszłych badań zależności diagramów fazowych od liczby spinów. Można by się wtedy pokusić również o bardziej kompleksowe porównanie wyników obliczeń modelowych z danymi eksperymentalnymi dla nanomagnetyków.

Ogólnie, oceniam *Rozprawę* jako bardzo dobrą. W opinii recenzenta, przedstawiona *Rozprawa* stanowi duże osiągnięcie badawcze Doktorantki, która wykazała się umiejętnością sprawnego posługiwania się różnymi metodami teoretycznymi fizyki kwantowej, umiejętnością krytycznej oceny otrzymanych wyników, dobrą znajomością badanego zagadnienia, i jest w stanie wskazać nowe perspektywy badań. *Rozprawa* zawiera nowe wartościowe wyniki pogłębiające znacząco zrozumienie fizycznych mechanizmów determinujących diagramy fazowe niezbyt dużej liczby spinów. Zdaniem recenzenta przedstawiona *Rozprawa* całkowicie spełnia wymagania ustawy i jednoznacznie kwalifikuje Doktoranta do otrzymania stopnia doktora. W związku z tym **wnoszę o dopuszczenie pani mgr Pamelii Kowalewskiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego.**

Z poważaniem



Prof. dr hab. Jacek A. Majewski