



dr hab. Magdalena Fitta, prof. IFJ PAN
Instytut Fizyki Jądrowej PAN
ul. Radzikowskiego 152
31-342 Kraków
Email: Magdalena.Fitta@ifj.edu.pl

Kraków, 29.06.2022

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Pamelii Kowalewskiej pt. „Teoretyczne badanie własności nanomagnetyków kwantowych metodą dokładnej diagonalizacji”

Praca doktorska Pani mgr Pamelii Kowalewskiej, przygotowana pod kierunkiem dr hab. Karola Szałowskiego, prof. UŁ w Katedrze Fizyki Ciała Stałego Uniwersytetu Łódzkiego, dotyczy badań teoretycznych wybranych magnetyków kwantowych o postaci klastrów złożonych z niewielkiej liczby spinów. Niskowymiarowe układy magnetyczne są obecnie szeroko badaną grupą materiałów, głównie ze względu na ich potencjał aplikacyjny: nanomagnesy zbudowane z pojedynczych atomów mogą znaleźć zastosowanie jako pamięci magnetyczne czy stać się pomocne w obliczeniach kwantowych. Dokładne wyznaczenie własności takich układów jest więc kluczowe dla rozwoju nowych dziedzin nauki i techniki. W związku z tym, tematyka badań podjętych przez Doktorantkę wpisuje się w bardzo ważny i intensywnie rozwijany trend badań.

Przedłożona do recenzji rozprawa została przygotowana w formie monografii liczącej 145 stron. Posiada ogólnie przyjęty układ, w skład którego wchodzi streszczenie rozprawy (w języku polskim i angielskim), krótki wstęp zawierający opis celowości podjętej tematyki, a następnie opis modelu teoretycznego oraz badanych układów magnetycznych. Zasadniczą część pracy stanowi rozdział opisujący otrzymane wyniki numeryczne dla wybranych nanomagnetyków wraz z ich analizą i dyskusją. Całość rozprawy wieńczy podsumowanie, wykaz oznaczeń używanych w pracy, spis rysunków oraz licząca 117 pozycji bibliografia.

Pierwszy rozdział ma charakter wprowadzający do tematu i poświęcony jest opisowi modelu teoretycznego wspólnego dla wszystkich badanych układów. Doktorantka najpierw szczegółowo przedstawiła formalizm zespołu kanonicznego dla układu magnetycznego, którego hamiltonian jawnie zawiera wyraz zależny od zewnętrznego pola magnetycznego, a następnie opisała termodynamiczny stan układu dla skończonej temperatury. W dalszej kolejności Pani mgr Kowalewska skoncentrowała się na termodynamice zjawiska magnetokalorycznego oraz na modelu Schottky'ego.

Rozdział drugi poświęcony jest opisowi badanych układów, czyli nanomagnetykowi o kształcie skończonej drabinki spinowej zawierającej 12 spinów oraz magnetykom molekularnym V₆ i Cu₅. Wszystkie te układy złożone są z atomów o spinie ½. Taki wybór

materiałów poddanych wnikliwej analizie teoretycznej jest argumentowany oczekiwaniem wyraźnych efektów kantowych, podczas gdy dla wyższych wartości spinów spodziewana jest tendencja do zachowywania się w bardziej klasyczny sposób.

W dalszej części tego rozdziału Doktorantka przedstawiła wybrane wyniki doświadczalne uzyskane w ostatnich latach dla nanowymiarowych materiałów magnetycznych, które miały stanowić dodatkową motywację do podjęcia badań zaprezentowanych w rozprawie. Według mnie, ta część pracy zawiera zbyt wiele przykładów, które opisane są bardzo pobieżnie- lepszym rozwiązaniem byłoby ograniczenie liczby omawianych układów, a jednocześnie dokładniejszy opis ich własności.

Rozdział 3 w całości poświęcony jest analizie własności wyznaczonych dla nanomagnetyka o kształcie skończonej drabinki składającej się z 12 spinów. Pierwszym poruszonym tu zagadnieniem jest diagram fazowy stanu podstawowego drabinki spinowej ilustrujący obszary stabilności dla faz o różnych wartościach składowej z całkowitego spinu. Wykresy fazowe przedstawiono w funkcji znormalizowanej całki wymiany oraz znormalizowanego pola magnetycznego dla dodatnich i ujemnych wartości całki wymiany J_1 . W kolejnym kroku Doktorantka podjęła się wyznaczenia funkcji korelacji spinowo-spinowych przy braku oraz w obecności pola magnetycznego. Tu jednak pojawia się inna numeracja spinów drabinki, niż ta zaproponowana na rysunku 2.3, dlatego chciałabym się dowiedzieć dlaczego w pracy ta kwestia nie została ujednolicona? Najciekawsze rezultaty otrzymane w tej części rozprawy dotyczą analizy rozkładu namagnesowania wzdłuż drabinki spinowej dla różnych temperatur i pól magnetycznych, a także lokalnego namagnesowania przedstawionego w funkcji znormalizowanej temperatury i znormalizowanego pola magnetycznego. Zaprezentowane tu wyniki pozwalają stwierdzić, że badany nanomagnetyk kwantowy wykazuje interesujące, zależne od miejsca położenia spinu właściwości magnetyczne. Szczególnie ciekawa jest obserwacja uporządkowania antyferromagnetycznego indukowanego przez pole magnetyczne dla pewnego zakresu sprzężeń.

Kolejny rozdział rozprawy obejmuje teoretyczne modelowanie własności magnetokalorycznych dwóch magnetyków molekularnych V6 oraz Cu5. Zrozumienie termodynamiki zjawiska magnetokalorycznego w klasterowych magnetykach molekularnych jest niezwykle ważne z punktu widzenia rozwoju chłodziarek magnetycznych. W pierwszej kolejności Doktorantka omówiła zachowanie się stanów własnych hamiltonianu funkcji zewnętrznego pola magnetycznego przyłożonego do układu. Następnie przedstawiła obliczenia dotyczące parametrów opisujących efekt magnetokaloryczny: entropii magnetycznej, magnetycznego ciepła właściwego oraz izotermicznej zmiany entropii magnetycznej. Na szczególną uwagę, zasługują wyniki badań dotyczące izotermicznej zmiany entropii. Pani mgr Kowalewska poddała wnikliwej analizie temperaturowe zależności izotermicznej zmiany entropii wyznaczonej dla różnych początkowych i końcowych wartości pola magnetycznego. Wykazała, że przebieg zależności $\Delta S_T(T)$ silnie zależy od amplitudy pola magnetycznego. Co więcej, możliwość przestrajania zależności $\Delta S_T(T)$ dotyczy dość szerokiego zakresu temperatur (od subkelwinów, do kilku K dla zmiany pola magnetycznego nieprzekraczającej kilku T). Jak zauważa sama Autorka, obserwowane wartości zmiany entropii dla obu badanych magnetyków są raczej małe, co wynika z małej liczby spinów i ich wartości. Niemniej jednak, wydajność efektu magnetokalorycznego silnie zależy również od kształtu krzywej $\Delta S_T(T)$. Zatem otrzymane rezultaty mogą być pomocne w poszukiwaniu

materiałów molekularnych wykazujących wysoką wydajność w procesie chłodzenia magnetokalorycznego.

Przedstawione w rozprawie wyniki zostały w dużej mierze opublikowane w czterech artykułach naukowych: trzy z nich ukazały się w czasopiśmie *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, a jeden w czasopiśmie *Materials*. Prócz Doktorantki, w każdej z wymienionych prac współautorem jest jej promotor dr hab. Karol Szałowski. Ponieważ udział Doktorantki w tych pracach nie jest dobrze zdefiniowany, proszę o określenie jej wkładu w ich powstanie.

Praca napisana jest starannie, poprawnym językiem, a jej struktura ma logiczny i przejrzysty charakter. W rozprawie można dopatrzeć się pewnych niedociągnięć natury edytorskiej jak np.:

- „Analizę rozpocząć można od zbadania diagramu fazowego stanu podstawowego 3.1. dla układu w zewnętrznym polu magnetycznym”,

- brak opisu osi na rysunku 3.1 c i 3.1 f

- pojawianie się kilku rysunków przed odwołaniem do nich w tekście rozprawy.

- na niektórych rysunkach znajdujemy opisy w języku angielskim

Te drobne i nieliczne uchybienia edytorskie nie wpływają jednak na bardzo dobry odbiór pracy.

Na zakończenie chciałabym podkreślić, że w pracy doktorskiej Pani Pamelii Kowalewskiej uzyskano bardzo ciekawe wyniki istotne dla zrozumienia lokalnych własności magnetycznych nanoukładów. Doktorantka przeprowadziła obszernie i dobrze zaplanowane badania, a następnie wnikliwie opisała uzyskane wyniki. Za najważniejsze osiągnięcia rozprawy Pani Kowalewskiej uważam:

1. Wykazanie nierównomiernego rozkładu namagnesowania w zależności od położenia spinu wzdłuż drabinki spinowej oraz obserwację ewolucji zachowania namagnesowania przy zmianie temperatury lub pola.

2. Analizę teoretyczną zależności entropii magnetycznej oraz ciepła właściwego od temperatury i pola magnetycznego dla układów V6 i Cu5. W szczególności wykazanie możliwości przestrajalności efektu magnetycznego poprzez odpowiedni dobór początkowych i końcowych wartości pola magnetycznego. Co więcej, wykazała, że wzrost początkowego lub końcowego pola magnetycznego w szerokim zakresie wartości prowadzi do zwiększenia szerokości schodkowej zależności temperaturowej izotermicznej zmiany entropii, podczas gdy wysokość stopnia pozostaje niezmienną. Kontrastuje to z typowym zachowaniem, gdzie maksymalna wielkość zmiany entropii rośnie wraz z wzrostem amplitudy pola magnetycznego.

Reasumując, praca doktorska Pani mgr Pamelii Kowalewskiej, pisana pod opieką dr hab. Karola Szałowskiego, prof. UŁ jest wnikliwym studium poświęconym badaniom teoretycznym nanoukładów magnetycznych. Z całym przekonaniem stwierdzam, że prezentowana rozprawa doktorska spełnia wymagania ustawowe dla rozpraw doktorskich i dlatego wnioskuję do Komisji Uniwersytetu Łódzkiego ds. stopni naukowych w dyscyplinie nauki fizyczne o dopuszczenie Doktorantki do dalszych etapów postępowania doktorskiego.

Kaprasiewicz R. He