

Ocena dorobku naukowego dr Marii Pugaczowej-Michalskiej, oraz recenzja jej pracy habilitacyjnej pt. „*Własności stanu podstawowego wybranych stopów Heuslera i związków międzymetalicznych z Ce na podstawie badań metodami z pierwszych zasad*”

Rozprawę habilitacyjną dr Marii Pugaczowej-Michalskiej pt. „*Własności stanu podstawowego wybranych stopów Heuslera i związków międzymetalicznych z Ce na podstawie badań metodami z pierwszych zasad*” stanowi dziesięć publikacji (PM1 - PM10) opublikowanych w renomowanych czasopismach naukowych w latach 1999 - 2008. W tym wykazie dorobku habilitantki aż 7 prac opublikowanych jest samodzielnie, co zasługuje na szczególną uwagę. W przypadku 3 pozostałych prac dołączono oświadczenia współautorów o ich udziale.

Do rozprawy dodano 33-stronicowy przewodnik po artykułach stanowiących rozprawę. Jednak to *omówienie cyklu publikacji* nie może moim zdaniem podlegać ocenie z kilku powodów.

Przewodnik napisany jest nieklarownie. Brakuje sprecyzowania celowości wielu obliczeń, przez co odnosi się wrażenie, że obliczenia wykonano przypadkowo. Autorka używa określeń, które nie są powszechnie używane a przez to nie są jasne, dla przykładu zacytuję kilka powtarzających się: *moment magnetyczny spada...*, *spadek intensywności pików 3d* (w rozumieniu gęstości stanów elektronowych o określonej symetrii kwantowej), *hybrydyzacja stanów 3d atomu Mn z pozostałymi elektronami nacechowana jest wyraźną zależnością spinową...*, *Rysunek 1 gęstości stanów dla jednego z badanych stopów Ni₂MnGe stanowi przykładową ilustrację ...*, *Dla półmetalicznego NiMnSb*

teoretyczna wartość temperatury Debye'a a wartość eksperymentalna są dobrze porównywalne, itd. W związku z tym pozwolę sobie na pozostawienie przewodnika po pracach bez oceny i przejdę do omówienia publikacji stanowiących rozprawę habilitacyjną.

Głównym tematem rozprawy są obliczenia struktury pasmowej wybranych stopów Heuslera. Stopy te, ze względu na prostą budowę, stanowią wdzięczny materiał do badań modelowych. Przedstawione w pracy badania miały na celu wyjaśnienie wpływu nieporządku atomowego oraz składu chemicznego na własności magnetyczne układów na bazie manganu: Ni_2MnX ($X = \text{B, Ge, In, Sn, Sb}$), NiMnSb i $\text{Cu}_{2-x}\text{Pd}_x\text{MnAl}$. W pracy zastosowano kwantowe metody obliczeniowe *ab initio*, a rezultaty obliczeń zawierają informacje o własnościach mikroskopowych w stanie podstawowym ($T=0$). Obliczenia wykonano z użyciem metod: LMTO (Linearized Muffin-Tin Orbitals) w przybliżeniu ciasnego wiązania z wykorzystaniem potencjału krystalicznego w przybliżeniu sfer atomowych, oraz FPLO (Full-Potential Local-Orbital). Zastosowane metody wykorzystują jednocząstkowy formalizm Kohna i Shama, oparty na Teorii Funkcjonału Gęstości Honenberga i Kohna.

W pracach PM.2 - PM.5 i PM.7 autorka prezentuje wyniki obliczeń struktury elektronowej dla stopów Heuslera Ni_2MnX ($X=\text{Ga, Ge, B}$) oraz dla układu NiMnSb z obsadzonymi w połowie pozycjami Ni.

NiMnSb jest szczególnie interesującym związkiem, dla którego teoretycznie wykazano *półmetaliczny ferromagnetyczny* stan podstawowy, w którym dla jednego kierunku spinu formuje się przerwa energetyczna na poziomie Fermiego. Habilitantka powtórzyła obliczenia dla tego układu, uzyskując podobne wyniki do tych, które uzyskiwano już wcześniej. Nowym wynikiem jest natomiast wykazanie metalicznego stanu (gęstości stanów na poziomie Fermiego dla dwóch polaryzacji spinowych $\text{DOS}_{\uparrow,\downarrow} \neq 0$) dla $\text{Ni}_{0.875}\text{Pt}_{0.75}\text{MnSb}$. Autorka wykazała, że nieporządek atomowy wynikający z domieszkowania podsieci Ni niszczy przerwę energetyczną dla stanów *mniejszościowych* i odgrywa podobną rolę jak nieporządek atomowy w stechiometrycznym układzie, powiązany z tzw. obsadzeniami "antisite". Kontynuacją tej pracy są obliczenia modułu

sprężystości objętościowej B w oparciu o analizę energii kryształu $E(V)$ i równanie stanu Murnaghana. W moim przekonaniu zbieżność obliczonego parametru B z eksperymentem jest miarą poprawności użytej do obliczeń metody, jak również potencjału korelacyjno-wymennego.

-Część wykonanych obliczeń bazuje na metodzie LMTO, bez uwzględnienia sprzężenia spin-orbita (S-O). W kilku pracach (m. inn. Ph. Mavropoulos i inni, Phys. Rev. B 69 (2004) 54424) wykazano, że sprzężenie S-O wnosi istotny wkład na spolaryzowaną gęstość stanów na poziomie Fermiego w ferromagnetycznych półmetalach. Na ile więc to sprzężenie jest istotne w rachunkach? (Tylko w 2 pracach stanowiących rozprawę habilitacyjną autorka uwzględnia sprzężenie S-O).

-Metoda LMTO jest skuteczna i szybka. Na ile wyniki z tej metody porównywalne są dla tej grupy stopów z obliczeniami w oparciu o inne metody. W pracy nie znalazłem takiej analizy, pomimo że obliczenia dla NiMnSb były wykonywane również metodą FPLO.

-Czy analizowano wyniki (LMTO i FPLO) dla NiMnSb przy użyciu tego samego potencjału korelacyjno-wymennego?

Interesujące są badania ściśliwości serii stopów Heuslera typu: Ni_2MnX dla $X=B, Ge, In, Sn, Sb$ w oparciu o obliczenia metodą FPLO. Najczęściej uzyskane wyniki nie mają odniesienia do eksperymentu, ale są porównywalne z wartościami modułów ściśliwości obliczonymi przez innych autorów. Te obliczenia autorka wykonuje w ramach jednej metody (FPLO) i przy użyciu potencjału korelacyjno-wymennego typu Perdewa i Wanga, stąd wyniki są wiarygodne i możliwe do porównania.

Odrębny temat, włączony do rozprawy habilitacyjnej stanowią obliczenia struktur elektronowych dla związków międzymetalicznych ceru $CeNi_4Z$, gdzie $Z=Al, Si, Ga$ i Cu . Tu autorka podejmuje współpracę z eksperymentalną grupą fizyków, badających te i podobne układy od dłuższego czasu. Zdają sobie dobrze sprawę z różnych problemów, stanowiących wyzwanie dla obliczeń *ab initio*; zasadniczy problem to uwzględnianie efektu korelacji. Coulombowska energia korelacji, zwykle około 3-6 eV, prowadzi do przesunięcia podpasma 4f do niższych energii wiązania (względem energii Fermiego), może też być przyczyną lokalizacji elektronów f. Habilitantka uzyskała wyjątkowo

dobłą zgodność pomiędzy elektronowym współczynnikiem ciepła właściwego γ określonym teoretycznie i z eksperymentu. Tak dobra zbieżność występuje bez subtelnego uzmienniania energii korelacji U. Wykazała też na drodze obliczeń, że badane związki Ce są paramagnetykami. Obliczone widma XPS dobrze opisują widma eksperymentalne.

Podsumowując; pomimo uwag krytycznych, dr Maria Pugaczowa-Michalska uzupełniła bazę światową danych w zakresie obliczeń struktur elektronowych stopów Heuslera na bazie manganu, wykazała się również znajomością odpowiednich metod obliczeniowych.

Dorobek naukowy habilitantki jest znaczący, opublikowała 6 prac przed doktoratem, a po uzyskaniu stopnia doktora opublikowała 45 prac w czasopismach z listy filadelfijskiej, podejmując współpracę z zespołami eksperymentatorów, m. in. z Instytutu Fizyki Molekularnej PAN w Poznaniu, Instytutu Fizyki Uniwersytetu w Białymstoku, czy Instytutu Fizyki Uniwersytetu Śląskiego.

Habilitantka brała udział w wielu konferencjach międzynarodowych w kraju i zagranicą, prezentując swoje wyniki głównie w postaci posterów. Przy dużej liczbie prac opublikowanych, liczba cytowań tych prac (bez cytowań własnych) mieści się w średniej krajowej i wynosi 96. Liczba wygłoszonych referatów na zaproszenie organizatorów konferencji jest skromna (jeden referat). Wynika to przypuszczalnie z faktu, że kontynuowane badania nie mają waloru unikalności, a analiza wyników nie wychodzi poza standardowy opis.

Dr Pugaczowa-Michalska prowadziła zajęcia dydaktyczne (ćwiczenia) ze studentami Politechniki Poznańskiej oraz była opiekunem 2 prac magisterskich, brała też czynny udział w organizowanych konferencjach „European Conference „Physics of Magnetism”. Odbyla dwa miesięczne zagraniczne wyjazdy naukowe.

W podsumowaniu mojej opinii, rozważając przedstawioną do recenzji rozprawę habilitacyjną oraz cały dorobek naukowy po doktoracie obejmujący łącznie 47 prac, uważam, że dr Maria Pugaczowa-Michalska spełniła wymagania stawiane ustawowo habilitantom i wnoszę o Jej dopuszczenie do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

