

Rezumat

Aceasta teza de abilitate prezinta cele mai semnificative rezultate teoretice obtinute de autoare in doua domenii importante pentru fizica solidelor: metode spectroscopice de investigare si respectiv calcule de structura electronica folosite in principal pentru descrierea proprietatilor solidelor magnetice. Rezultatele prezentate in aceasta teza au fost obtinute si publicate dupa 10.12.2004, cand subsemnata a obtinut titlul de doctor rerum naturalium la Universitatea Ludwig-Maximilians din Munich, cu aprecierea Magna cum laude, lucrand apoi din noiembrie 2005 ca si cercetator stiintific la Universitatea Babes-Bolyai. In ceea ce priveste descrierea teoretica a metodelor spectroscopice, contributiile stiintifice majore ale autoarei sunt legate de dezvoltarea unor noi metode de calcul pentru imprastierea Compton si respectiv pentru anihilarea pozitronica in solide. Interpretarea teoretica a profilului Compton este o metoda foarte utila pentru descrierea proprietatilor electronice (precum densitatea de moment sau localizarea densitatii de spin) iar rezultatele obtinute prin folosirea acestei metode sunt prezentate in Capitolul 1. Cateva dintre investigatiile descrise in aceasta teza sunt legate de studiul corelatiilor electronice in profilele magnetice Compton (MCPs) ale Fe si Ni. In particular, s-a pus in evidenta rolul acestor corelatii asupra structurii electronice a Ni. Mai exact, conexiunea intre satelitul de la 6 eV din spectrul de fotoemisie in banda de valenta a Ni si contributia larga a MCP din fereastra energetica corespunzatoare acestui satelit (Benea et al. [1]) fac posibila evidentierea modificarilor in structura electronica a Ni datorate acestor corelatii.

Un alt studiu a pus in evidenta efectul combinat al dezordinii si a corelatiilor electronice din aliajele $\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}$ si respectiv FeNi. Studiile noastre demonstreaza ca prin considerarea corelatiilor electronice, realizate folosind metoda Density Mean Field Theory (DMFT), se redistribuie densitatea de moment intre zonele Brillouin ale FeNi (ordonat) si respectiv $\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}$ (dezordonat), aparand diferente semnificative intre spectrele MCP ale celor doua aliaje (Benea et al. [2]) cu aceeasi compozitie.

Analiza radiatiei emise in experimentul de anihilare pozitronica 2D-ACAR ('Angular Correlation of electron-positron Annihilation Radiation') sta la baza reconstructia densitatii de moment electronic in spatiul reciproc. In acest domeniu, contributia autoarei s-a evidentiat prin dezvoltarea unei descrieri teoretice a metodei 2D-ACAR de anihilare pozitronica, ce a fost aplicata cu succes metalelor 3d (V si Ni) [3, 4]. Includerea corelatiilor electronice printr-o abordare de tip DMFT ('Dynamical Mean Field Theory') s-a dovedit un pas important in imbunatatirea descrierii suprafetelor Fermi ale acestor metale. Abordarea combinata, experimentală si teoretica (in colaborare cu grupul prof. dr. C. Hugenschmidt de la TU Munich) pentru obtinerea densitatii de moment (pentru V) si respectiv densitatii de spin (pentru Ni) este prezentata in Capitolul 2.

Spectroscopia de fotoemisie, ca metoda de investigare a proprietatilor electronice ale solidelor, a fost folosita in intr-o serie de studii - pentru descrierea structurii electronice a nanoclusterilor metalici (Ag si Au) inglobati in matrici bioactive de $\text{CaO-SiO}_2\text{-P}_2\text{O}_5$ dar si a materialelor magnetice de tip 'bulk', precum $\text{MnNi}_{1-x}\text{Sb}_x$ si $\text{Mn}_{2-x}\text{Co}_x\text{VAI}$. Proprietatile electronice ale acestor materiale, precum localizarea densitatii de sarcina, hibridizarea intre straturile electronice exterioare sau dependenta structurii electronice de dimensiunea clusterilor metalici [5, 6, 7, 8] sunt prezentate in Capitolul 3.

Calculul de structura electronica pentru investigarea proprietatilor electronice si magnetice ale solidelor au fost efectuate pentru diferite tipuri de sisteme: straturi subtiri, clusteri sau materiale de tip 'bulk'. Cateva din aceste studii, prezentand investigatiile teoretice si experimentale ale campurilor hiperfine in Fe_{16}N_2 dopat cu Zr si Ti [9] si respectiv studiul ordonarii de spin in starea fundamentala a $\text{Hf}_{1-x}\text{Ta}_x\text{Fe}_2$ [10, 11] sunt prezentate in Capitolul 4. De asemenea, in acelasi capitol sunt prezentate

studiile teoretice si experimentale asupra compusilor $\text{HoFe}_{2-x}\text{Al}_x$ and $\text{Er}_{1-x}\text{Zr}_x$ cu structura cubica (C15) si respectiv hexagonala (C14) privind efectul substituentilor (Al si Zr) asupra magnetizarii, a structurii de spini, a temperaturii Curie si a proprietatilor magnetocalorice [12, 13].

Cele mai recente studii efectuate in activitatea de cercetare a autoarei privesc domeniul spintronicii (Capitolul 5), urmarind dezvoltarea de noi materiale half-metalice cu comportament ferimagnetic compensat (HMFi). Avantajul folosirii acestor materiale se datoreaza diminuarii fluxurilor magnetice create si implicit a pierderilor energetice in cazul transportului de spin. Investigatiile au fost efectuate asupra aliajelor de tip Heusler $\text{Mn}_{2-x}\text{Co}_x\text{VAI}$, $\text{Mn}_{2-x}\text{Cu}_x\text{VAI}$ si respectiv $\text{Mn}_2\text{V}_{1-x}\text{Co}_x\text{VAI}$ [8, 14, 15, 16]. Aceste studii au permis selectarea unei serii de compusi propusi pentru a fi luati in considerare la construirea de noi dispozitive spintronice.

Acumularile care au stat la baza carierei profesionale, precum si planurile de dezvoltare ale activitatilor didactice si respectiv stiintifice ale autoarei sunt prezentate in Capitolul 6.