

Prof. dr hab. Janusz Adamowski
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Akademia Górniczo-Hutnicza
30-059 Kraków, al. Mickiewicza 30
tel. 012-6172974, faks 012-6340010
e-mail: adamowski@fis.agh.edu.pl
<http://www.fis.agh.edu.pl/~adamowski>

**Recenzja rozprawy habilitacyjnej dr. inż. Urszuli Wdowik
z tytułem „Badanie z pierwszych zasad silnie skorelowanego
elektronowo układu z defektami punktowymi”**

Habilitantka, dr inż. Urszula Wdowik, przedstawiła do oceny cykl 6 publikacji oraz obszerny Raport, w którym omówiła swoje główne osiągnięcia naukowe, autoreferat i załączniki, w których podała informacje o swojej aktywności naukowej na forum międzynarodowym i krajowym oraz dorobku dydaktycznym. Ponadto załączyła wykaz swoich artykułów naukowych opublikowanych w czasopiśmie znajdujących się w bazie Journal Citation Reports. Wszystkie publikacje, wybrane przez habilitantkę do oceny, ukazały się w renomowanych czasopiśmie naukowych o wysokich wartościach wskaźnika Impact Factor (w tym cztery zostały opublikowane w Physical Review B). Oświadczenia współautorów oraz habilitantki wskazują na jej istotny i dominujący udział w powstaniu tych artykułów naukowych. Ponadto pani dr Urszula Wdowik jest autorką lub współautorką 6 artykułów naukowych opublikowanych przed otrzymaniem stopnia naukowego doktora i 25 – opublikowanych po otrzymaniu stopnia naukowego doktora oraz 6 prac naukowych opublikowanych w materiałach konferencyjnych ujętych w bazie Web of Science. Liczba cytowań publikacji pani dr Wdowik przekracza 160, indeks Hirscha opublikowanych przez nią artykułów naukowych wynosi 6. Wynika stąd, że czysto scjentometryczna ocena dorobku naukowego habilitantki jest wystarczająco wysoka do podjęcia przez nią starań o przyznanie jej stopnia doktora habilitowanego.

W trakcie swojej pracy zawodowej na Uniwersytecie Pedagogicznym w Krakowie pani dr Wdowik współpracowała z dwoma znakomitymi fizykami: prof. Krzysztofem Ruebenbauerem, znanym w Polsce i świecie specjalistą w zakresie spektroskopii mössbauerowskiej, oraz prof. Krzysztofem Parlińskim, wybitnym teoretykiem specjalizującym się w badaniach własności materiałów za pomocą zaawansowanych metod obliczeniowych. Współpraca z tymi świetnymi fizykami wywarła istotny, bardzo pozytywny wpływ na ukształtowanie się sylwetki naukowej pani dr. Wdowik. W szczególności widać, że prof. Parliński ukierunkował badania, których wyniki stanowią podstawę jej habilitacji. Mogę jednak stwierdzić, że badania te zostały wykonane przez habilitantkę samodzielnie.

Zajmę się teraz merytoryczną oceną osiągnięć naukowych pani dr Wdowik przedstawionych przez nią do oceny. W tym celu posłużę się tekstami 6 publikacji cyklu oraz ich omówieniem w raporcie, opracowanym przez habilitantkę. Przedmiotem badań, których wyniki zostały opublikowane w cyklu 6 publikacji, są własności elektronowe, magnetyczne i fononowe tlenku kobaltu (CoO), materiału wykazującego silne korelacje pomiędzy elektronami walencyjnymi. Opis własności materiałów zawierającymi układy silnie skorelowanych elektronów jest ważny dla badań podstawowych z zakresu fizyki ciała stałego, a ponadto ma istotne znaczenie aplikacyjne w elektronice spinowej. Pani dr Wdowik podjęła

to wyzwanie i wniosła znaczący wkład w zrozumienie podstawowych zjawisk fizycznych zachodzących w tlenkach metali przejściowych.

Przedstawiony do oceny cykl publikacji można podzielić na 2 grupy: (1) publikacje o numerach [E1-E4] dotyczą głównie własności elektronowych czystych i zdefektowanych kryształów CoO (w publikacji [E1] zaprezentowane są wyniki odnoszące się do własności elektronowych i fononowych), (2) publikacje [P1, P2] zawierają wyniki obliczeń drgań sieci w idealnym i zdefektowanym kryształ CoO.

W części I Raportu omówione są metody i przybliżenia stosowane do badań własności tlenku kobaltu. Do obliczenia elektronowej struktury pasmowej habilitantka zastosowała metodę funkcjonałów gęstości w przybliżeniu lokalnej gęstości spinowej (LSDA) rozszerzonej o rozwinięcie gradientowe. Jako potencjały oddziaływań zostały przyjęte odpowiednio dobrane pseudopotencjały rozwinięte na fale płaskie. Ze względu na fakt, że przybliżenie LSDA nie odtwarza poprawnie przerwy energetycznej, habilitantka wprowadziła do obliczeń dodatkowy parametr $U_{eff} = U - J$, gdzie U jest parametrem opisującym oddziaływanie elektron-elektron w modelu Hubbarda, a parametr J jest lokalnym przybliżeniem energii wymiennej. Jak widać z tego uproszczonego opisu metoda stosowana przez habilitantkę opiera się na określonej hierarchii przybliżeń i zawiera parametry dopasowania, a zatem nie może być nazywana metodą „ab initio”. Przez metodę obliczeń „ab initio”, czyli metodę obliczeń z pierwszych zasad mechaniki kwantowej, rozumiemy metodę, w której na wejściu zadane są wyłącznie uniwersalne stałe przyrody, takie jak ładunek elementarny czy stała Plancka, oraz liczby porządkowe i masowe pierwiastków, a na wyjściu dostajemy energie i funkcje falowe. Metodą taką jest np. metoda mieszania konfiguracji (CI), która jednak ze względu na szybko rosnącą złożoność obliczeniową jest obecnie stosowana do obliczeń własności atomów i molekuł o niewielkiej liczbie elektronów. Natomiast metoda stosowana przez habilitantkę w swej istotnej części oparta jest na wykorzystaniu parametrów dopasowania. Użycie parametrów U i J ma ponadto dodatkową wadę, polegającą na tym, że parametry te mają sens energii oddziaływań kontaktowych. Przybliżenie oddziaływań pomiędzy elektronami, które posiadają niezerowy zasięg, oddziaływaniami kontaktowymi wydaje się być zbyt grubym przybliżeniem. Podejście LSDA z parametrami U i J jest jednak w literaturze naukowej powszechnie nazywane „metodą ab initio”, a habilitantka – nieco bezkrytycznie – przejęła tę nazwę. Moim zdaniem habilitantka zdawała sobie sprawę z dyskusyjnego charakteru stosowanego przybliżenia, ponieważ przedstawiła pogładową ilustrację wpływu doboru parametru U na obliczone wartości stałej sieci, spinowego momentu magnetycznego jonu kobaltu i przerwy energetycznej na Rys. 3 zamieszczonym w Raporcie (Fig. 1 w publikacji [E1]).

W swoich obliczeniach dr Wdowik posługiwała się głównie dwoma pakietami obliczeniowymi, opracowanymi przez innych autorów. Były to pakiety VASP, opracowany pod kierunkiem G. Kresse na Uniwersytecie Wiedeńskim, oraz PHONON, opracowany przez Krzysztofa Parlińskiego. Posługiwanie się gotowymi pakietami obliczeniowymi ma swoje zalety i wady. Do zalet należą wiarygodność kodów, sprawdzonych przez wielu różnych autorów, oraz ich efektywność obliczeniowa, natomiast wadą jest brak kontroli użytkownika nad programami i stosowanymi przybliżeniami numerycznymi. W naukach posługujących się obliczeniami na dużą skalę taki sposób pracy staje się obecnie standardem, a zatem pomimo drobnych zastrzeżeń należy uznać, że habilitantka idzie „z duchem czasu”.

Pierwsza w cyklu publikacja [E1] poświęcona jest badaniu idealnego kryształu tlenku kobaltu. Publikacja ta stworzyła podstawy do dalszych badań CoO o zdefektowanej sieci

krystalicznej. W publikacji [E1] przedstawiona została dyskusja doboru parametru Hubbarda U . Wartość parametru U została dopasowana tak, aby wyniki obliczeń odtwarzały eksperymentalnie wyznaczoną przerwę energetyczną (Fig. 1). W dalszym ciągu obliczeń (oraz w innych publikacjach cyklu) używane były te same wartości parametrów: dopasowana na podstawie wykresu Fig. 1 wartość $U = 7.1$ eV oraz raczej arbitralnie przyjęta wartość 1 eV dla parametru J . Jednakże takie ustalenie wartości parametrów dopasowania na początku obliczeń oraz – pomimo pokusy uzyskania lepszej zgodności z eksperymentem – brak zmian tych parametrów w trakcie dalszych obliczeń dobrze świadczy o rzetelności autorów publikacji. Na podstawie obliczonej w publikacji [E1] elektronowej struktury pasmowej tlenku kobaltu stwierdzono, że materiał ten jest tzw. izolatorem z transferem ładunku, chociaż ze względu na wartość eksperymentalnie wyznaczonej przerwy energetycznej ($E_g = 2.5$ eV) należałoby stwierdzić, że jest to po prostu półprzewodnik. Ciekawym wynikiem pracy [E1] jest obliczenie relacji dyspersji fononów z bezpośrednim zastosowaniem sił Hellmanna-Feynmana. Obliczone relacje dyspersji fononów (Fig. 3) dobrze zgadzają się z danymi doświadczalnymi otrzymanymi z elastycznego rozpraszania neutronów. Ponadto w pracy [E1] przedstawione są wyniki obliczeń średnich kwadratowych amplitud drgań atomów i wkładu sieciowego do ciepła właściwego kryształu. Również te wyniki obliczeń dobrze zgadzają się z danymi eksperymentalnymi.

Publikacja [E2] zawiera wyniki obliczeń dla czystego tlenku kobaltu poddanego działaniu ciśnienia hydrostatycznego. Autorzy publikacji [E2] pokazali – w zgodności z doświadczeniem – transformację fazy antyferromagnetycznej do fazy niemagnetycznej z towarzyszącą temu przejściu redukcją objętości komórki krystalicznej. Wykazali także, że ciśnienie zewnętrzne powoduje zamykanie się przerwy energetycznej, co wynika z poszerzenia pasm energetycznych. Ponadto obliczyli odpowiednie zmiany momentu magnetycznego. Szkoda, że obliczenia nie zostały rozszerzone na przypadek ciśnienia jednoosiowego. Pomimo to wyniki publikacji [E2] są ciekawe, a ich interpretacja fizyczna wydaje się być poprawna.

Struktura elektronowa kryształu CoO zawierającego wakansje została zbadana w pracy [E3]. Uwzględniono wakansje w sieci kationowej, czyli niedobór atomów kobaltu. Obliczenia zostały wykonane dla stosunkowo dużych (rzędu kilku procent) koncentracji wakansji. Powstaje pytanie, jak zmieniają się własności elektronowe CoO przy mniejszych koncentracjach defektów. Autorzy [E3] wykazali, że w sieci CoO zawierającej wakansje następuje zmiana walencyjności kobaltu z dwuwartościowej na trójwartościową. Otrzymane wyniki obliczeń są zgodne z danymi eksperymentalnymi, otrzymanymi z emisyjnych widm móssbauerowskich.

W pracy [E4] dr Wdowik zbadła wpływ domieszek podstawieniowych Fe, Al i In na własności strukturalne, elektronowe i magnetyczne tlenku kobaltu. W pracy [E4] habilitantka dokonała dopasowania dalszych parametrów modelu, czyli tzw. promieni „muffin tin”, które określają efektywne zasięgi potencjałów atomowych. Ciekawym wynikiem publikacji [E4] jest wyznaczenie parametrów oddziaływań nadsubtelnych dla domieszki Fe w zdefektowanej sieci CoO. Autorka zbadła redukcję przerwy energetycznej pod wpływem stanów akceptorowych. Otrzymane wyniki [E4] są zgodne z danymi eksperymentalnymi.

Publikacje [P1, P2] zawierają wyniki obliczeń dynamiki sieci wykonane dla czystego i zdefektowanego kryształu tlenku kobaltu. Obliczenia częstości fononów wykonano dokonując diagonalizacji macierzy dynamicznej, natomiast stałe siłowe zostały obliczone z użyciem dopasowanych parametrów oddziaływań Hubbarda i wymiennego. W opisie

własności drgań sieci użyteczną wielkością jest tzw. filtr, zdefiniowany wzorem (4) w [P1], który pozwala na określenie natężenia rozważanego modu drgań.

W publikacji [P1] przedstawione są wyniki obliczeń dynamiki drgań sieci dla czystego kryształu CoO i kryształu CoO zawierającego ok. 3% podstawieniowych domieszek Fe. Ciekawe jest porównanie wyników dla obu tych przypadków pokazane na Fig. 2 i 3. Fig. 3 wyraźnie pokazuje, że w kryształach domieszkowanym, czyli nie posiadającym pełnej symetrii krystalicznej, relacje dyspersji fononów tracą sens, ponieważ dla wybranej gałęzi fononowej częstość drgań nie jest jednoznaczna funkcją wektora falowego. Natomiast do opisu drgań kryształu zdefektowanego przydatne są gęstości stanów fononowych (wstawka do Fig. 3 i Fig 4). Fig. 5 [P1] przedstawia średnie kwadraty amplitud wychyleń jonów z położenia równowagi w funkcji temperatury. Niestety na s. 27 Raportu (Rys. 18 i 19) te same wielkości zostały niepoprawnie nazwane „amplitudami ruchu termicznego”. Porównanie obliczonych i zmierzonych średnich kwadratów amplitud wychyleń jonów (Fig. 5 [P1]) wykazuje zgodność odpowiednich wartości liczbowych.

Publikacja [P2] zawiera wyniki obliczeń dynamiki drgań sieci wykonanych dla kryształu CoO zawierającego wakansje jonów kobaltu. Na Fig. 2 i 3 przedstawiono tzw. „natężenia krzywych dyspersji fononów” oraz odpowiednie gęstości stanów. Podobnie jak dla CoO domieszkowanego Fe wykresy te pokazują, że w CoO zawierającym wakansje pojęcie fononów jako kwantów fal odkształceń sprężystych sieci krystalicznej traci sens fizyczny. Obliczone średnie kwadraty amplitud wychyleń jonów z położenia równowagi wykazują dobrą zgodność z dostępnymi danymi eksperymentalnymi.

Wyniki, przedstawione w cyklu publikacji [E1-E4, P1, P2], zostały podsumowane w częściach III F i IV A Raportu, zatytułowanych „Wnioski”. Habilitantka dokonała szczegółowej analizy swoich wyników oraz wskazała na problemy, które pozostały do rozwiązania. Dyskusja i analiza zawarte we wnioskach, umieszczone w Raporcie, świadczą o dojrzałości habilitantki i jej zdolności do formułowania problemów do rozwiązania.

Dr Wdowik posiada spory dorobek naukowy z lat 1991-2005, czyli okresu przed otrzymaniem stopnia naukowego doktora (1998) i kilku lat po doktoracie. Najważniejszymi osiągnięciami habilitantki z tego okresu są udział w badaniach dynamiki sieci, defektów w materiałach i mechanizmów dyfuzji za pomocą spektroskopii mössbauerowskiej i rozpraszania promieniowania synchrotronowego oraz zbadanie dynamiki sieci układów wykazujących efekt Jahn-Tellera. Habilitantka realizowała we współpracy z Instytutem Fizyki Materiałów Czeskiej Akademii Nauk program badań struktury elektronowej i dynamiki sieci quasi-jednowymiarowych struktur magnetycznych, natomiast we współpracy z Instytutem Fizyki Jądrowej PAN w Krakowie i szwajcarskim instytutem badań materiałowych prowadziła badania teoretyczne transportu jonów w lekkich związkach dla potrzeb magazynowania energii. Dorobek naukowy z lat 1991-2005, opublikowany w 25 artykułach naukowych, które w większości ukazały się w renomowanych czasopiśmie naukowych, wskazuje na szeroki zakres tematyki badawczej habilitantki.

Habilitantka uczestniczyła (i nadal uczestniczy) w realizacji 3 międzynarodowych i krajowych projektów badawczych. Ponadto współpracowała z kilkoma międzynarodowymi i krajowymi instytucjami naukowymi, m.in. szwajcarskim federalnym laboratorium badań materiałowych, Instytutem Lauego-Langevina w Grenoble, Instytutem Fizyki Materiałów w Wiedniu, Instytutem Chemii i Biochemii w Montrealu (Kanada) i Instytutem Fizyki

Uniwersytetu w Purdue (USA). Dr Wdowik brała udział i wygłosiła referaty na kilkunastu międzynarodowych konferencjach naukowych, ponadto była współorganizatorem trzech międzynarodowych warsztatów naukowych zatytułowanych „Ab Initio Phonon Calculations” w Krakowie. Habilitantka współpracowała przy uruchomieniu dużego klastra obliczeniowego w Instytucie Techniki na Uniwersytecie Pedagogicznym w Krakowie, była współautorką oprogramowania do obsługi aparatury pomiarowej oraz brała udział w budowie stanowiska do przygotowywania próbek monokrystalicznych do pomiarów mössbauerowskich.

Jako nauczyciel akademicki zatrudniony na Uniwersytecie Pedagogicznym dr Wdowik prowadziła wiele wykładów, ćwiczeń rachunkowych i laboratoryjnych, m.in. z zakresu fizyki ogólnej, fizyki ciała stałego, fizyki jądrowej, fizyki cząstek elementarnych i różnych działów informatyki. Była opiekunką 11 ukończonych prac dyplomowych. Ponadto brała udział w pracach zespołów przygotowujących nowe plany i programy studiów na Uniwersytecie Pedagogicznym w Krakowie. W zakresie tych osiągnięć chciałbym wyróżnić współautorstwo programów nauczania na kierunku „Fizyka z Elementami Inżynierii Materiałowej”, realizowanego w ramach Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki współfinansowanego przez Unię Europejską. Do ważnych zasług habilitantki należy jej działalność popularyzatorska, w tym aktywny udział w trzech festiwalach nauki.

Warto zauważyć, że dr Wdowik została wybrana na Zastępcę Dyrektora Instytutu Fizyki Akademii Pedagogicznej w Krakowie i pełniła tę funkcję w latach 2003-2004.

Na podstawie przedstawionych mi do oceny dokumentów stwierdzam, że habilitantka jest osobą znaną i cenioną przez światową i polską społeczność fizyków, posiada znaczny dorobek naukowy, udokumentowany artykułami naukowymi opublikowanymi w czasopiśmie naukowych o wysokich wartościach wskaźnika Impact Factor, posiada osiągnięcia w międzynarodowej współpracy naukowej i umiejętność realizacji programów tej współpracy, a ponadto może się wykazać znacznym dorobkiem dydaktycznym i popularyzatorskim.

W podsumowaniu stwierdzam, że dr inż. Urszula Wdowik posiada znaczące osiągnięcia naukowe, ważne dla fizyki ciała stałego, które zostały opublikowane zarówno w monotematycznym cyklu publikacji, stanowiącym jej rozprawę habilitacyjną, jak i w pozostałych artykułach naukowych spoza cyklu. Moim zdaniem dr inż. Urszula Wdowik posiada kwalifikacje do samodzielnej pracy naukowej. Habilitantka w zupełności spełnia kryteria potrzebne do otrzymania stopnia naukowego doktora habilitowanego.

Popieram wniosek o nadanie pani dr. Urszuli Wdowik stopnia naukowego doktora habilitowanego.



prof. dr hab. Janusz Adamowski

Kraków, 10 kwietnia 2012