



INSTYTUT KATALIZY I FIZYKOCHEMII POWIERZCHNI

IM. JERZEGO HABERA, POLSKA AKADEMIA NAUK

Prof. dr hab. Ewa Broclawik

Kraków, 30.07.2014

**RECENZJA OSIĄGNIĘCIA NAUKOWEGO DR MAŁGORZATY WIERZBOWSKIEJ
ZATYTUŁOWANEGO: „*WŁASNOŚCI NOWOCZESNYCH MATERIAŁÓW OTRZYMANE
Z PIERWSZYCH ZASAD ORAZ WKŁAD W ROZWÓJ METOD OBLICZENIOWYCH*”**

**ORAZ OCENA DOROBKU NAUKOWEGO, DYDAKTYCZNEGO I ORGANIZACYJNEGO
(NA PODSTAWIE MATERIAŁU UJĘTEGO W AUTOREFERACIE).**

UWAGI OGÓLNE

Kariera naukowa pani dr Małgorzaty Wierzbowskiej, kandydatki do uzyskania stopnia naukowego doktora habilitowanego rozwijała się w dziedzinie fizyki teoretycznej ciała stałego, a bardziej precyzyjnie w zakresie materiałów pół-przewodnikowych i pół-metalicznych o właściwościach magnetycznych. Teoretyczny opis właściwości tych układów wymaga uwzględnienia silnej korelacji elektronowej, co zbliża je do układów metali przejściowych badanych przeze mnie metodami chemii kwantowej. Prace z okresu przed doktoratem były typowymi pracami obliczeniowymi, chociaż staże w grupie profesora Volkera Staemmlera wzbogaciły zainteresowania Autorki o eksperyment na powierzchni. W dalszej karierze dominowały prace teoretyczne dotyczące struktury materiałów charakteryzujących się silną korelacją elektronową, co idzie w parze z ciekawymi własnościami magnetycznymi.

Nie będę tu podsumowywać życiorysu naukowego kandydatki, który wydaje mi się potraktowany w Autoreferacie w sposób bardzo niepełny. Z pewnością rozwijał się on raczej różnie w różnych okresach, co zapewne spowodowane było częstą zmianą afiliacji. Należy tu jednak podkreślić, że Autorka zawsze poszukiwała ciekawych grup i zagadnień. Po bardzo intensywnym początkowym rozwoju nastąpił kilkuletni zanik aktywności (być może przeniósł się on do zupełnie innej dziedziny?). Z wielką satysfakcją należy odnotować udany powrót na scenę naukową, udokumentowany serią ciekawych publikacji, w tym kilku zupełnie niezależnych. Cenne jest także to, że Autorka powraca do tematyki rozpoczętej w pierwszym okresie swojej działalności. Zbiegło się to także z nawrotem zainteresowania dziedziną związaną z materiałami o ciekawych właściwościach magnetycznych wobec rozwoju metod obliczeniowych, sprzężonym ściśle z rozwojem podejścia teoretycznego (prace Autorki z roku 2004 są ponownie często cytowane).

Analiza danych scientometrycznych dotyczących prac opublikowanych do momentu złożenia wniosku habilitacyjnego (ponad 11 cytowań na jedną pracę), nie pozostawiają wątpliwości, że Autorka spełnia kryteria ilościowe stawiane kandydatowi do uzyskania stopnia doktora habilitowanego. Przedmiotem osiągnięcia naukowego będącego podstawą wniosku o wszczęcie postępowania jest cykl 12 prac opublikowanych wyłącznie w czasopiśmie o wysokiej randze naukowej, których współautorzy wyraźnie oświadczyli, że wkład głównej Autorki jest wiodący i może stanowić jej osobisty dorobek. Pięć z nich jest zresztą wyłącznego autorstwa kandydatki. Pomimo tego, że Autorka często zmieniała afiliacje, dobór tematyki podyktowany jest wyraźnie jej osobistymi zainteresowaniami i jej napędem badawczym. W mojej opinii świadczy to o silnej osobowości badawczej Kandydatki, która kazała Jej raczej szukać grup, gdzie będzie mogła się realizować niż pracować „na zamówienie”.

Wyodrębnione części merytoryczne Autoreferatu to „Magnetyzm – półprzewodniki magnetyczne i nanomagnetyczne”, „Nadprzewodnictwo – wkłady elektronowe, fononowe i od fluktuacji spinowych, parametry dla modelu C60”, oraz „Grafen”. Do osiągnięć naukowych Kandydatka zalicza także (całkiem słusznie) „Wkład w rozwój metod obliczeniowych i programów komputerowych”. W części dotyczącej magnetyzmu Kandydatka zawiera skrótową analizę mechanizmu sprzężeń ferro- lub antyferromagnetycznych, szkoda tylko, że nie podaje tu bardziej szczegółowo odnośników literaturowych (podobnie jest zresztą w pozostałych częściach). Z mojego punktu widzenia, lektura tych rozdziałów pozwala dostrzec, jak w tej dziedzinie zaciera się granica pomiędzy chemią teoretyczną a fizyką teoretyczną. Z jednej strony wychodzimy od opisu elektronów

„niemal” swobodnych w metalu lub półprzewodniku (gdzie schemat Kohna-Shama oraz przybliżenie lokalne jest bardzo naturalne), w którym silna korelacja jest jedynie zaburzeniem a więc poprawka na korelację może być uwzględniana wybiórczo do fragmentów badanego obiektu (np. centrów metali z powłokami d i f). Pozwala to sformułować efektywne metody z parametrami półempirycznymi (np. LDA+U). W tradycyjnej chemii kwantowej natomiast, gdzie obiektem badań jest cząsteczka chemiczna, wyjście od jednorodnego gazu elektronowego było raczej nienaturalne i sukcesy osiągnięte na gruncie wiązania chemicznego przez schemat Kohna-Shama w przybliżeniu lokalnym były zaskoczeniem, niezbyt uzasadnionym. Elektrony w wiązaniu chemicznym są z definicji silnie skorelowane i powinny być opisane metodami skorelowanej funkcji falowej. Tutaj niestety, poszukiwanie metody korygującej efektywnie błąd korelacji nie jest proste, co objawia się wielością potencjałów korelacyjno-wymiennych, formułowanych nieraz *ad hoc* i parametryzowanych specyficznie do problemu.

Obydwa podejścia powinny się „gładko” spotkać i uzupełnić w opisie nowoczesnych materiałów, zwłaszcza magnetycznych, gdzie mamy do czynienia z układami periodycznymi, jednak w różnym stopniu związanymi kowalencyjnie. Tak jednak nie jest i dla mnie dosłowna interpretacja części właściwości magnetycznych poprzez np. kształt stanu typu s, p czy d, lub też hybrydyzację z orbitalami sąsiada (np. 4p arsenu) jest zbyt „obrazkowa”. Trzeba wyraźnie zastrzec, że tego typu dyskusja jest prowadzona w modelowym języku, specyficznym dla przyjętego modelu teoretycznego i nie należy się dziwić, że dla układów, które wyłamują się z przyjętych założeń (tutaj „niemal” swobodnych elektronów) obserwuje się znacznie odstępstwa. Wydaje się, że nie unikniemy spojrzenia na właściwości wielu materiałów z perspektywy orbitali molekularnych a właściwie „molekuło-podobnych”, które potraktujemy jako pewne jednocząstkowe stany pomocnicze, służące do konstrukcji stanów wieloelektronowych (w obrazie w pełni skorelowanym).

Powyższa krytyka przyjętego sposobu interpretacji wielu zjawisk poprzez stany jednoelektronowe (jedynie „ubrane” w korelację) nie podważa wielu osiągnięć tak skonstruowanej teorii ciała stałego w dziedzinie nowoczesnych materiałów magnetycznych. Zaslugą Autorki jest to, że w ramach tego paradygmatu stara się jak najpełniej włączyć w opis układu zarówno korelację jak i sprzężenia z ruchami cząstek cięższych (jąder atomowych).

Zasadniczą częścią kolejnego rozdziału Autoreferatu, poświęconego nadprzewodnictwu, są rozważania nad próbami opisu gęstości par elektronowych (gęstości anomalnej), niezbędnego dla odtworzenia właściwości układów nadprzewodzących, w szczególności energii kondensacji. Zagadnienie to związane jest ściśle z problemem silnej

korelacji elektronowej i jej efektywnego odtworzenia a więc stanowi kontynuację linii badawczej Autorki. Oprócz oddziaływań czysto elektronowych i elektronowo-fononowych, jednym z głównych elementów nadprzewodnictwa są fluktuacje spinowe, co stanowi kolejny wspólny element badawczy. Sprzężenie elektron-fonon czy magnon jest kolejnym trudnym problemem, wspólnym dla fizyki i chemii (wywodzącym się wprost z przybliżenia Born-Oppenheimera czy jego uogólnień). Opis *ab initio* pełnego układu jąder i elektronów (w tym sprzężeń wibronowych) nie jest wciąż jeszcze możliwy ani dla molekuly ani dla ciała stałego; istnieją tylko pewne rozwiązania modelowe, np. dla wiązania wodorowego w chemii. Podobnie też postępowała Autorka, proponując pewne rozwiązania numeryczne, służące do policzenia sprzężenia elektron-fonon i z kolei do rozwikłania zagadnienia nieciągłości temperatury krytycznej kondensacji dla niobu w zależności od ciśnienia (wnioski z tej pracy jednak nie uzyskały przychylności recenzentów i nie może być ona formalnie włączona do osiągnięcia naukowego będącego podstawą habilitacji). Obecnie zagadnienie to jest mniej intensywnie badane, gdyż uważa się, że większe znaczenie mają silne korelacje elektronowe a co za tym idzie, rozwój metod DFT radzących sobie efektywnie z tym problemem.

Wobec tego Autorka zwróciła się w stronę skorelowanych metod funkcji falowej i zastosowała je do opisu struktury multipletowej jonów fulerenowych. Dla tej makromolekuly można z powodzeniem stosować formalizm przyjęty w fizyce dla układów o symetrii centralnej i badać wpływ odkształcenia od tej symetrii na rozkład poziomów energetycznych. Praca nad fulerenami jest więc kontynuowana i artykuł Autorki doczekał się szeregu cytowań. Naturalną kontynuacją zainteresowania właściwościami tej makromolekuly jest podjęcie tematyki „chemicznej” przy pracy nad grafenem w projekcie SiCMAT. Ze spisu publikacji można się jedynie domyślać, że podjęcie tej pracy umożliwiło Autorce powrót do badań naukowych i w pierwszej kolejności zajęcie się niedokończonymi pomysłami z tematyki związanej z magnetyzmem i nadprzewodnictwem. Dopiero w dalszej kolejności powstały dwie prace związane z grafenem, z których jedna została uznana za osiągnięcie własne (nie dziwi to zupełnie w kontekście sporej zmiany w tematyce). W pracy tej (Nr 12 w spisie) Autorka zajęła się przeciwieństwem energetyką elementarnych procesów związanych z chemisorpcją cząsteczki propenu na grafenie, tematyką zupełnie egzotyczną dla fizyka. Wydaje się na podstawie opisu tematów w realizacji, iż tematyka ta niekoniecznie będzie kontynuowana i że Autorka ma zamiar wrócić do zagadnień bardziej zakorzenionych w fizyce, a to anomalnego przewodnictwa Halla w cienkich warstwach dotowanego manganem arsenku galu czy materiałów spintronicznych i optoelektronicznych opartych na półprzewodnikach metalo-organicznych.

W podsumowaniu tych rozważań ogólnych pragnę stwierdzić na podstawie całości Autoreferatu, że Habilitantka ma dobrze udokumentowane przygotowanie do samodzielnego podjęcia ambitnej, w znacznym stopniu interdyscyplinarnej tematyki badawczej, jaką jest szeroko pojęte teoretyczne badanie właściwości materiałów magnetycznych, spintronicznych i optoelektronicznych. Posiada także udokumentowane osiągnięcia w wybranej dziedzinie, pozwalające spodziewać się dalszych, ciekawych odkryć. Jednakże, w świetle wymogów stawianych przez odpowiednie rozporządzenia szczegółowe recenzentowi, nieodzownym uzupełnieniem Autoreferatu powinien być w miarę szczegółowy Życiorys naukowy Kandydatki. Muszę przyznać, że brakuje mi takiego opracowania aby całościowo ocenić dojrzałość Habilitantki do samodzielności badawczej w kategoriach przygotowania merytorycznego, dydaktycznego oraz organizacyjnego.

OCENY SZCZEGÓŁOWE

DOROBEK NAUKOWY

Rozwój działalności naukowej pani dr Małgorzaty Wierzbowskiej jest konsekwentny w całym okresie jej działalności naukowej, z niewiadomych dla mnie przyczyn wyraźnie nicciągłym. Po zapoznaniu się z całością dorobku Habilitantki wyrobiłam sobie opinię, że jej rozwój jest wyraźny. Powtórzę tutaj, że mimo częstych zmian afiliacji Autorki, dobór tematyki podyktowany jest wyraźnie jej osobistymi zainteresowaniami i jej napędem badawczym. W mojej opinii świadczy to o silnej osobowości badawczej Kandydatki, która kazała Jej raczej szukać grup, gdzie będzie mogła się realizować niż pracować „na zamówienie”. Warto także zauważyć, że konsekwentnie poszerzana była paleta stosowanych metodologii numerycznych, równoległe do rozwoju metod teoretycznych oraz rozwoju złożoności obliczeniowej w miarę błyskawicznej w dzisiejszych czasach ewolucji technologii komputerowych. Cenne jest także, iż wyniki prac wykonanych na wczesnych etapach badań nie ulegają zasadniczej rewizji w świetle nowszych metodologicznie badań; zastosowanie udoskonalonych technik eksperymentalnych i nowych narzędzi modelowania prowadzi raczej do uściślenia bądź rozszerzenia zakresu uzyskanych informacji i otwiera dostęp do interpretacji szerszego spektrum zjawisk.

Całościowy dorobek naukowy to w chwili obecnej 21 publikacji, z tego 4 przed doktoratem (wymienionych w Autoreferacie, nie wszystkie w czasopismach z listy filadelfijskiej). W moim odczuciu, wartościowym elementem dorobku dr Małgorzaty Wierzbowskiej jest wykorzystywanie warsztatu badawczego grup, w których pracowała, do

własnych zainteresowań badawczych. Wiązało się to często z koniecznością wprowadzania nowych elementów do istniejących metodologii oraz modyfikowania istniejących (bądź też pisanie od początku) kodów komputerowych.

Podsumowując moją ocenę dorobku naukowego dr Małgorzaty Wierzbowskiej stwierdzam, że dorobek ten pokazuje, że habilitantka jest dobrze ukształtowanym badaczem, posiadającym określoną dziedzinę badawczą dobrze wpisującą się w nurt rozwojowy nowoczesnej fizyki i nauki o materiałach, oraz z otwartymi perspektywami rozwoju.

DOROBEK DYDAKTYCZNY I ORGANIZACYJNY

Kariera zawodowa dr Małgorzaty Wierzbowskiej niemal w całości związana była z instytucjami naukowymi za granicą (gdzie do roku 2007 przebywała na stażach bądź była zatrudniana na czasowo ograniczonych kontraktach). Jej ostatnia afiliacja w Polsce także związana była bezpośrednio z realizacją projektu SiCMAT. W związku z tym można podejrzewać, że nie miała ona pola do popisu na gruncie działalności organizacyjnej, a tym bardziej dydaktycznej. Autorka Autoreferatu nie ułatwia zresztą recenzentowi pracy nad wyrobieniem sobie opinii w tej materii, gdyż w Autoreferacie nie ma praktycznie żadnych informacji na ten temat. Można jedynie podejrzewać, że podczas gdy w pierwszym okresie Kandydatka głównie przyswajała sobie wiedzę i metodologię stosowaną przez pracodawców (twórczo ją jednak rozwijając), to w okresie ostatnim zapewne musiała nauczyć młodych współpracowników i przekazać im część swojej wiedzy.

Brakuje w Autoreferacie sformułowania tez, które byłyby podstawą pewnego rodzaju expose naukowego, gdyż (w moim przekonaniu) habilitacja powinna być przepustką do samodzielności badawczej na podstawie określonego programu naukowego. Moje informacje na temat dotychczasowych osiągnięć dydaktycznych i organizacyjnych dr Małgorzaty Wierzbowskiej są także ograniczone, a więc nie do końca mam pewność, w jaki sposób Kandydatka zorganizuje własny warsztat badawczy z chwilą uzyskania samodzielności oraz zaoferuje przyszłym adeptom nauki szeroką gamę ciekawych tematów i solidną opiekę naukową.

PYTANIA SZCZEGÓŁOWE

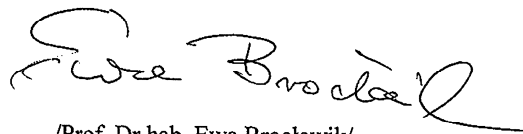
Z obowiązku recenzenta powinnam zamieścić bardziej szczegółową listę nieścisłości i znaków zapytania, które nasuwają się w trakcie czytania rozprawy habilitacyjnej. Moje główne zastrzeżenia wywodzą się jednak raczej z innego, niż Kandydatka, rozumienia samej idei habilitacji. Nie będę tu powtórnie omawiała niedomogów Autoreferatu, prowadzących do trudności związanych z odpowiednim sformułowaniem szczegółowych ocen (wymaganych od recenzenta przez wewnętrzne zarządzenia) czy też moich osobistych poglądów na charakter i kształt rozprawy habilitacyjnej, tak więc szczegółowa lista obejmie w zasadzie niedomogi natury technicznej a nie merytorycznej.

- Studiowanie Autoreferatu utrudnione jest przez to, że 12 prac ujętych w zestawieniu na str. 7 ma swoją prostą numerację, natomiast teksty publikacji umieszczone w materiałach zawierają także te, które z różnych względów nie mogły być zaliczone do listy osiągnięć naukowych; przy zachowaniu ciągłej numeracji pełnych tekstów, pozycje wybranych prac są inne niż w Autoreferacie.
- Brakuje w Autoreferacie odnośników literaturowych (z danymi bibliograficznymi) innych, niż własne a to utrudnia usytuowanie osiągnięć Autorki na tle nauki światowej (zwłaszcza recenzentowi z dziedziny innej, chociaż pokrewnej).
- W wielu miejscach Autoreferatu stosowany jest rodzaj „żargonu” używanego w tej dziedzinie fizyki. Mam tutaj uwagę ogólną, że tego typu opracowania powinny być mniej hermetyczne, gdyż będą oceniane w szerszym kontekście przez grono specjalistów, także spoza dziedziny. Odnosiłam się już wcześniej krytycznie do zbyt dosłownego używania terminów ściśle uwarunkowanych modelem. Niech posłuży przykładem akapit z pracy na temat dotowanego manganem arsenku galu, gdzie Autorka pisze o proveniencji stanu magnetycznego jako pochodzącego od konfiguracji d^5 na manganie z „dziurą sprzężoną antyferromagnetycznie”. Poza użyciem szczególnego słownictwa, samo pojęcie sprzężenia antyferromagnetycznego jest ściśle związane z modelowym opisem: na przykład może się ono okazać w rzeczywistości superpozycja stanów, jeśli metoda obliczeniowa jest w stanie dokładnie (a nie tylko efektywnie) uwzględnić korelację statyczną. Eksperyment także może nie dać kategorycznej odpowiedzi, bo wynik może zależeć od skali czasowej pomiaru.

WNIOSKI KOŃCOWE

Prace dr Małgorzaty Wierzbowskiej, stanowiące podstawę recenzowanej rozprawy habilitacyjnej, przedstawiają znaczące osiągnięcie naukowe skoncentrowane na wynikach badań nad mechanizmami rządzącymi magnetyzmem i nadprzewodnictwem. Indeks cytowań prac przedstawionych do recenzji potwierdza także, że temat jest przyszłościowy i jego dalsze rozwijanie przez Autorkę może przynieść cenne odkrycia naukowe. Przedstawione w części szczegółowej uwagi krytyczne dotyczą raczej szczegółów technicznych i nie wpływają na merytoryczną ocenę rozprawy. Wobec tego uważam, że dorobek naukowy uzasadnia wniosek o nadanie dr Wierzbowskiej stopnia doktora habilitowanego. Nie miałam możliwości wyrobienia sobie opinii, czy Dr Małgorzata Wierzbowska posiada w pełni wystarczające doświadczenie i osiągnięcia dydaktyczne, które dają dobre prognozy co do jej perspektywicznej działalności jako nauczyciela i samodzielnego wychowawcy młodej kadry naukowej. Wobec tego nie mogę sformułować opinii, czy wniosek pani dr Małgorzaty Wierzbowskiej spełnia wszystkie kryteria określone przez **Rozporządzenie Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego** z dnia 1.09.2011 w sprawie kryteriów osiągnięć osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego.

W konkluzji stwierdzam, że rozprawa habilitacyjna Dr Małgorzaty Wierzbowskiej „*Własności nowoczesnych materiałów otrzymane z pierwszych zasad oraz wkład w rozwój metod obliczeniowych*” spełnia warunki określone przez ustawę o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki z dnia 14 marca 2003 roku (Dz. U. R.P. z 2003 nr. 65 poz.595, Dz. U. z 2011 r., nr 84, poz. 455) i wnoszę o dopuszczenie Kandydatki do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.



/Prof. Dr hab. Ewa Broclawik/