

Stanisław Krukowski  
Instytut Wysokich Ciśnień PAN  
01-142 Warszawa  
ul Sokołowska 29/37

Rada Naukowa  
Instytutu Fizyki PAN  
w Warszawie

**Recenzja rozprawy habilitacyjnej dr Małgorzaty Wierzbowskiej  
pt „Własności nowoczesnych materiałów otrzymane z pierwszych zasad oraz wkład w  
rozwój metod obliczeniowych”**

Rozprawa habilitacyjna dr Małgorzaty Wierzbowskiej pt „Własności nowoczesnych materiałów otrzymane z pierwszych zasad oraz wkład w rozwój metod obliczeniowych” zawiera dwanaście publikacji poświęconych obliczeniom z pierwszych zasad własności układów fazy stałej oraz podstawom obliczeń z pierwszych zasad dla fazy skondensowanej. Prace te zawierają obliczenie dotyczące półprzewodników, nadprzewodników, układów nanowymiarowych, w tym fullerenów, nanodrutów metali oraz warstw grafenu. Ta ostatnia praca dotyczy nie własności grafenu, lecz jego wzrostu metodą VPE przy użyciu argonu, co było związane z badaniami w ramach projektu Sicmat. Prace te zawierają imponująco szeroki zakres zainteresowań, półprzewodniki, nadprzewodniki i układy nanowymiarowe. Prace te są opublikowane w renomowanych czasopismach, w tym 5 w Physical Review B, oraz po jednej w Journal of Applied Physics, Chemical Physics, Computer Physics Communications, Journal of Physics Condensed Matter, The European Physical Journal B, Physical Chemistry Chemical Physics, oraz Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. Należy podkreślić, że dr Wierzbowska jest jedynym autorem trzech z tych prac, w pięciu pracach jest dwu autorów, natomiast w czterech jest trzech autorów. W 10 pracach jest pierwszym autorem, natomiast w dwu pozostałych jest dwu autorów. Dorobek ten został osiągnięty w latach 2004-2014, a więc w ciągu 10 lat. Jakość publikacji i autorstwo stanowi, więc wystarczającą podstawę do przeprowadzenia rozprawy przyznającej stopień doktora habilitowanego z fizyki.

Małgorzata Wierzbowska jest autorką czterech prac przed obroną pracy doktorskiej oraz 17 prac po obronie spełnia, więc wymogi stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego. Liczba prac nie jest imponującą, gdyż jest to 17 prac na 14 lat, a więc jedna publikacja na rok. Nie jest to w żadnym wypadku zadowalające, należy podkreślić, że są to w ogromnej większości prace publikowane w czasopismach o wysokim czynnikiem oddziaływania (impact factor), co wpływa pozytywnie na ogólną ocenę jej dorobku naukowego. Liczba cytowań 210, w tym 174 bez autocytowań nie jest zbyt imponująca, lecz jest to typowa sytuacja dla prac teoretycznych, gdzie cytuje się tylko wyniki o dużym znaczeniu dla innych prac. W sumie pod względem statystycznym należy ocenić dorobek dr Wierzbowskiej, jako niezły, jednak te prace mają stosunkowo niewiele związku z fizyką doświadczalną, co charakteryzuje chyba całokształt jej działalności naukowej. Wydaje się, że należałoby zwrócić większą uwagę na ten aspekt działalności w przyszłości i radykalnie zmienić typ działalności, bo na pewno nie jest to dobra sytuacja. Dodatkowo te prace są z różnych dziedzin, co powoduje, że nie ma istotnego związku pomiędzy nimi.

Pierwszym problemem naukowym omawianym w rozprawie są własności półprzewodników półmagnetycznych, a w szczególności GaMnAs i GaMnN, którym są poświęcone dwie prace ([1] i [2]). Pierwsza nich podejmuje problem domieszki manganu w GaAs i GaN. Autorzy posługują się pakietem Siesta, w którym została przez nich wprowadzona poprawka U do kodu DFT. Autorzy identyfikują różne stany manganu w tych półprzewodnikach i określają sprzężenie z dziurą, jako prowadzące do uporządkowania ferromagnetycznego jonów Mn. Wyjaśniają to silną hybrydyzacją p-d prowadzącą do rozszczepienia spinowego pasma walencyjnego. Ponadto znajdują różne stany jonu Mn w GaAs i GaN oraz wskazują na różny zasięg sprzężenia ferromagnetycznego pomiędzy Mn w tych półprzewodnikach: długi w GaAs i krótszy w GaN. Wskazują na anizotropowy charakter sprzężenia magnetycznego w GaN. W późniejszej pracy autorzy otrzymują dodatkowe wyniki uwzględniające przybliżenia rozwinięte w ciągu 10 lat (PSIC oraz bazy MLWF), co prowadzi do

wyników dotyczących lokalizacji funkcji dziur w półprzewodnikach o niskich składach Mn. Wykazują, że funkcje dziur są zdelokalizowane w całej objętości dla niskich koncentracji Mn, natomiast dla wyższych lokalizują się w kompleksie Mn-As.

Kolejne trzy prace ([3], [4] i [5]) są poświęcone zagadnieniom domieszki renu w krzemie, co spowodowane było informacjami na temat ferromagnetyzmu w półprzewodniku w temperaturze pokojowej, w tym przypadku krzemu domieszkowanego renem. Pierwsza praca z serii ([3]) jest poświęcona własnościom domieszki renu w krzemie badanym za pomocą wersji PW przybliżenia GGA. Dla uwzględnienia poprawek korelacyjnych poprawka U była również zastosowana w tej pracy. W pierwszej części pracy różne pozycje atomu renu w sieci krzemu były badane, w tym podstawieniowa (S), międzywęzłowa w węzle o symetrii tetragonalnej (I) i heksagonalnej (H), podstawieniowej z obecnością krzemu w pozycji międzywęzłowej tetraedrycznej (E) oraz w położeniu dwu-wakansyjnym (D). Najbardziej stabilne położenie jest w pozycji podstawieniowej, natomiast położenie międzywęzłowe tetraedryczne ma energię wyższą o 0.24 eV, co prowadziło autorów do wniosku że obydwa położenia występują w krzemie. Pozostałe 3 konfiguracje mają energię wyższą o ponad 1 eV, więc w zasadzie rzadko występują w rzeczywistych kryształach krzemu. Autorzy komentują wkład relaksacji do energii tworzenia, który jest różny dla różnych konfiguracji. Zakładam że energie tworzenia uwzględniają te zmiany. Autorzy identyfikują magnetyczne konfiguracje S, H i D. Wykazują że wychwytywanie elektronu może depolaryzować domieszkę podstawieniową, co zachodzi w typie n. W typie p możliwe jest że konfiguracja I jest bardziej stabilna, lecz jest nieaktywna magnetycznie. Pozostałe konfiguracje nie grają istotnej roli ze względu na wysokie energie tworzenia. W zasadzie magnetyczna jest, więc odmiana typu p krzemu domieszkowanego renem. Kolejne dwie prace z tego cyklu są autorstwa dr Wierzbowskiej wyłącznie i dotyczą pewnych aspektów tego zagadnienia. Pierwsza z nich dotyczy oddziaływania pary domieszek podstawieniowych renu, tzn. w konfiguracji S z poprzedniej pracy. W pracy zostały użyte obliczenia ab initio do określenia wielkości całek wymiany które użyte zostały w symulacjach Monte Carlo do określenia własności magnetycznych w skończonych temperaturach. Określone zostały temperatury dla różnych koncentracji, przy czym w koncentracjach rzędu 7% (GGA) lub 3% (GGA+U) są to temperatury pokojowe. Kolejna praca jest również poświęcona temu zagadnieniu, z tym że rozszerzono zakres obliczeń na pary w których jeden lub obydwa atomy renu są w pozycjach międzywęzłowych. Określono że domieszka w pozycji (I) jest magnetyczna na skutek zmiany energii stanów domieszki względem pasm. Pary mieszane mają znikający moment magnetyczny, dla uzyskania magnetyzmu potrzebne jest, więc uzyskiwanie par jednego typu. Deklaruje się że domieszkowaniem krzemu można uzyskać wymagany typ przewodnictwa, z tym że proponowane koncentracje mogą sprawiać pewne trudności. Prace te wyjaśniają pewne aspekty układu Si-Re, w szczególności wysoką temperaturę krytyczną, co stanowi istotny wkład do rozwoju badań w dziedzinie spintroniki. Inne aspekty, w tym znikanie namagnesowania w długim czasie niestety pozostają niewyjaśnione.

Praca [6] poświęcona jest własnościom struktury elektronowej monodrutów palladu, niklu i miedzi. Praca jest trudna do zrozumienia, gdyż pojawia się pojecie monowire, które jest dosyć nowe w literaturze. W zasadzie można się chyba domyślać tylko, że jest to drut o pojedynczej atomowej grubości (wyjaśnione to jest w autoreferencie). Dodatkową trudność sprawia fakt, że nie ma atomowego schematu badanej struktury! Praca zawiera studium zależności struktury pasmowej układu od amplitudy parametru U od 0 do 9eV. Naturalnie powoduje to znany efekt przesunięcia pasm i powstania przerwy dla wysokich wartości U. Autorzy studiują również własności magnetyczne tych drutów wskazując, że np. magnetyzm w drutach Pd jest regulowany przez transfer ładunku pomiędzy pasmami s i d, na co wpływają efekty korelacyjne. Ponadto autorzy badają własności mechaniczne w tym położenia równowagi i punkty przełamania. Ogólnie mam trudności z oszacowaniem znaczenia fizycznego tych wyników, ale zapewne jest ona ważna skoro była cytowana aż 25 razy.

Kolejne trzy prace ([7], [8] i [9]) były poświęcone zjawiskom nadprzewodnictwa w metalach w niskich temperaturach. W pracy [7] zaprezentowano nowy program dedykowany do obliczeń, oparty na metodzie funkcjonału gęstości wykonany przez dr Wierzbowska pod kierunkiem prof Krogha. W programie wylicza się energie korelacji par elektronów poprzez wyliczenie energii korelacji za pomocą przybliżenia faz przypadkowych (RPA). Energię kondensacji wylicza się poprzez odjęcie energii pary przy znikającym i nie znikającym potencjale parowania  $\Delta$ . W kolejnej pracy ci sami autorzy obliczyli energie kondensacji dla elektronowego gazu, bez uwzględnienia fluktuacji. Następną samodzielną pracą była poświęcona uwzględnieniu fluktuacji spinu i wyliczeniu temperatur

krytycznych dla V, Mo, Ta, Pd i Nb. Pewne różnice pomiędzy wynikami obliczeń oraz wynikami pomiarów powstały na skutek mało dokładnych wartości stałych wymiany ze spinem oraz uśrednienia funkcji spektralnych na poziomie Fermiego.

Kolejna praca [10] zawiera wspólny element związany z obecnością nadprzewodnictwa w kryształach molekularnych fullerenów  $C_{60}$  w sieci regularnej centrowanej objętościowo domieszkowanych dziurowo. Dr Wierzbowska używała w tym przypadku metod chemii kwantowej (CAS SCF), korzystając ze wcześniejszych doświadczeń w pracy doktorskiej. Wyniki dotyczyły stałych oddziaływania w hamiltonianie Hubbarda dla stanu podstawowego.

Dr Wierzbowska odbyła szereg staży zagranicznych w bardzo dobrych ośrodkach naukowych. Zgodnie z tym miała sposobność powiększenia swoich umiejętności, o których również pisze w autoreferencie. Pozwoliło to jej na prowadzenie prac naukowych wykorzystując nabyte umiejętności zarówno w uzyskiwaniu wyników jak i w opracowywaniu programów do obliczeń. Rokuje to dobrze również na jej perspektywy pracy w przyszłości.

Przedostatnia [11] praca jest zupełnie inna, opisuje reakcje powierzchniowe związane ze wzrostem grafenu na podłożach SiC metodą CVD przy użyciu propanu, jako źródła węgla. W pracy tej obliczono energie rozpadu  $C_3H_8$  do  $C_3H_7$  oraz  $C_3H_6$  przez odłączenie wodoru, a następnie przez adsorpcję produktów rozpadu na powierzchni. Autorzy konkludują, że argon obecny w fazie gazowej sprzyja reakcji osadzania grafenu. Podają też szereg danych, dotyczących barier energetycznych na reakcje w fazie gazowej i na powierzchni SiC. Praca wnosi szereg istotnych danych dla zrozumienia reakcji osadzania grafenu z fazy gazowej.

Ostatnia praca z cyklu [12] jest poświęcona sformułowaniu poprawek do pseudopotencjału, uwzględniających samoodziaływanie, wylczeniu sił i zaimplementowaniu ich w kodzie Quantum Espresso. Pracy autorzy demonstrują prawidłowość otrzymanych wyników dla szeregu związków, w tym ZnO,  $LaTiO_3$ ,  $YTiO_3$ . Otrzymane wyniki wskazują, że otrzymany kod jest wartościowym narzędziem dla modelowania wielu kryształów w przyszłości.

Dr Wierzbowska uzyskała swoje wyniki stosując szereg różnych technik obliczeniowych, w tym kilka wersji metod ab initio, metody kwantowej mechaniki statystycznej oraz Monte Carlo. Są to metody zaawansowane o dużym stopniu trudności. Otrzymane wyniki świadczą o tym, że dr Wierzbowska dobrze opanowała te zagadnienia, i wniosła własny wkład do tych metod w postaci programów uzupełniających i poprawiających te metody obliczeniowe.

W dokumentacji rozprawy brak jest szeregu istotnych informacji, w tym życiorysu, podsumowania działalności dydaktycznej, popularyzatorskiej i innych. Nie ma też informacji na temat realizacji grantów za wyjątkiem projektu Sicmat. Wydaje się że jest to zwyczajne niedopatrzenie dr Wierzbowskiej, ale tych informacji brak co należy ocenić ujemnie. Z dokumentacji wynika, że dr Wierzbowska włożyła wielu wysiłku w prace nad opracowaniem nowych kodów obliczeniowych co będzie służyło wielu innym badaczom w ich pracy naukowej. Dlatego też należy pozytywnie ocenić jej wkład w tej dziedzinie, jako pracę na rzecz społeczności naukowej, bardzo istotną dla wielu badaczy.

Dr Wierzbowska brała udział w stypendiach w wielu doskonałych ośrodkach naukowych, co należy ocenić bardzo pozytywnie.

Podsumowując ocenę dorobku naukowego dr Wierzbowskiej stwierdzam, że dr Wierzbowska spełnia wymogi związane z uzyskaniem stopnia doktora habilitowanego. W związku z tym zgodnie z Art. 26 Ustawy z dnia 14 marca 2003 roku o stopniach naukowych i tytule naukowym (Dziennik Ustaw Nr 65 poz. 595 wraz ze zmianami w Dziennik Ustaw z 2005 roku Nr 164, poz. 1365) wnioskuję do Rady Naukowej Instytutu Fizyki Polskiej Akademii Nauk o dopuszczenie dr Małgorzaty Wierzbowskiej do dalszego postępowania kwalifikacyjnego w celu nadania stopnia doktora habilitowanego nauk fizycznych.

*SŁ. KUKOWSKI*

Prof. dr hab. Stanisław Krukowski

Warszawa 11.08.2014