

Kraków, 24-09-2012 r.

**Ocena dorobku naukowego i innych osiągnięć dra Mikhaila G.Brika
w związku z postępowaniem o nadanie stopnia doktora habilitowanego**

Na podstawie otrzymanych dokumentów stwierdzam, że dr Mikhail G.Brik uzyskał tytuł magistra z fizyki w Państwowym Uniwersytecie w Kubaniu w 1992 roku, obroną pracy magisterskiej z wyróżnieniem p.t. "Spectra of Cr^{+3} ions in Y_2SiO_5 and $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ crystals". W 1995 roku uzyskał stopień doktora (kandydat nauk fizycznych i matematycznych) za rozprawę p.t. "Non-radiative transitions in impurity centers with strong electron-vibrational interaction", której promotorem był prof. V.F. Pisarenko. Tematyka prac stanowiących rozprawę habilitacyjną jest bardzo ściśle powiązana z pracami z okresu doktoratu. Została ponadto wzbogacona badaniami struktury elektronowej wybranych układów krystalicznych, w ramach formalizmu DFT i interpretacją ich własności fizycznych uwarunkowanych naturą stanu podstawowego. Dr Mikhail G.Brik w latach 1988-2002 pracował w Państwowym Uniwersytecie w Kubaniu, awansując od doktoranta do stanowiska profesora nadzwyczajnego. W latach 2000-2007 pracował na Uniwersytecie w Asmarze, Erytrea, w Weizmann Institute of Science, Rehovot, Izrael, na Uniwersytecie Kwansai Gakuin Sanda i Uniwersytecie Kyoto w Japonii. Od 2007 roku pracuje na Uniwersytecie w Tartu, Estonia, obecnie na stanowisku profesora w Laboratorium Spektroskopii Laserowej. Dr Mikhail G.Brik jest autorem lub współautorem 189 artykułów naukowych opublikowanych po uzyskaniu stopnia dra nauk fizycznych. Uczestniczył w licznych projektach badawczo-naukowych, będąc głównym wykonawcą niektórych z nich. Brał udział w 19 konferencjach międzynarodowych, w czasie których miał kilka wykładów za zaproszeniem. O randze tych prac, ich atrakcyjności i wartości poznawczej świadczy fakt, że są one cytowane dość często, co zostało starannie udokumentowane szczegółowym wykazem cytowań w autoreferacie. Z tego pokaźnego dorobku, autor włączył do rozprawy 15 publikacji powszechnie dostępnych w znanych czasopismach fizycznych. Dołączył także oświadczenia współautorów tych prac, z których wynika wiodąca rola dra Mikhaila G.Brika w ich powstaniu. Te 15 publikacje autor rozmieścił w 4 grupach tematycznych. W pierwszej grupie znalazło się 5 prac, poświęconych analizie struktury energetycznej metali przejściowych w kryształach, w ramach teorii pola krystalicznego. W drugiej grupie są 2 prace poświęcone obliczeniom z pierwszych zasad własności optycznych jonów domieszek w kryształach. W trzeciej grupie jest praca poświęcona nieradiacyjnym przejściom i oddziaływaniom elektronowo-wibronowym dla jonów 3d w kryształach. Czwarta grupa prac najliczniejsza, liczy 7 prac i jest poświęcona obliczeniom *ab initio* własności strukturalnych, elektronowych, optycznych i elastycznych kryształów czystych i domieszkowanych.

W następnej części opinii są zamieszczone moje uwagi dotyczące metodologii i oceny wagi tych prac w poznaniu tych działów fizyki i ich innowacyjnej roli w zastosowaniach praktycznych. Podstawy teorii pola krystalicznego i teorii pola ligandów stanowią już poniekąd klasyczny obszar kwantowej teorii układów wieloatomowych, włączając w to ciała stałe. Zostały sformułowane w pierwszej połowie ubiegłego stulecia. Od początku stały się niezwykle ważnym i płodnym instrumentem w interpretacji widm optycznych wielu domieszek w kryształach. Stało się to głównie dzięki wykorzystaniu metod teorii grup i bogatej symetrii atomów i jonów swobodnych w ośrodkach krystalicznych, znakomicie upraszczających metodologię obliczeniową i pozwalające na przejrzystą interpretację różnorodnych widm eksperymentalnych. W miarę postępu w technice obliczeniowej, przy dzisiejszych możliwościach komputerowych, rola symetrii w interpretacji wyników jest nadal ogromna, aczkolwiek dla czystości stwierdzenia, że badania danego układu są *ab initio*, symetria tego układu winna być raczej wynikiem tych obliczeń a nie stanowić danych wejściowych charakteryzujących układ. Mimo pozornej prostoty modelowych hamiltonianów stosowanych w praktycznych zastosowaniach teorii pola krystalicznego, współczynniki charakteryzujące efektywne potencjały oddziaływania są nadal dużym wyzwaniem, gdy chcemy je obliczyć z pierwszych zasad. Przyczyna tego tkwi w tym, i nie dotyczy to tylko teorii pola krystalicznego, ale także i innych formalizmów w tym teorii pasmowej, że mamy do czynienia z niejednorodnymi wieloelektronowymi układami kwantowymi, w rozwiązywaniu których postęp jest widoczny, ale końca tej drogi nie widać. Dr Mikhail G.Brik w pierwszej grupie prac zajmuje się badaniami domieszek jonów 3d w kryształach. Obliczenia struktury elektronowej wykonał w oparciu o hamiltonian w modelu wymiany ładunku (exchange charge model., ECM), który aczkolwiek jest modelem w dużej mierze fenomenologicznym dedykowanym głównie jonom ziem rzadkich (RE), został zastosowany z dużym powodzeniem do analizy widm optycznych wielu układów krystalicznych domieszkowanych jonami z powłoką 3d. Habilitant w ramach tych prac napisał wiele modułów oprogramowania, które pozwoliły mu w ramach ścisłej współpracy z grupami doświadczalnymi na interpretację licznych wyników eksperymentalnych. Najważniejszym walorem opublikowanych prac w tej grupie jest to, że były one wykonywane na układach aktualnie mierzonych, podejrzewanych przez doświadczalników o własności ważne dla praktycznych zastosowań. Na odnotowanie zasługuje szerokie spektrum jonów (Cr^{+3} , Cr^{+4} , Co^{+2} , Mn^{+4} , Fe^{+5}), badanych w różnych otoczeniach krystalicznych od wysokiej symetrii do symetrii niskiej, W pracy [2] są połączone po raz pierwszy obliczenia w modelu ECM i modelu superpozycyjnego (SM), bardzo popularnym w wielu grupach badawczych. Taka weryfikacja wyników z dwóch różnych sposobów ich pozyskiwania jest niewątpliwie bardzo cennym osiągnięciem, bo pozwala na bardziej wiarygodne zidentyfikowanie istotnych fizycznie parametrów pola krystalicznego i ich wpływu na własności strukturalne, elektronowe, optyczne i

elastyczne różnych kryształów domieszkowanych. W pracach [6] i [7] autor stosował wariacyjną wieloelektronową metodę (discrete variational multielectron method, DVMF) w pełnym sformułowaniu relatywistycznym, do obliczeń struktury elektronowej poziomów energetycznych i widm absorpcyjnych dla jonów 3d i 4f w takich kryształach jak ZnS i Cs₂NaYCl₆. Te obliczenia posłużyły do analizy wielkości efektów kowalencyjnych, struktury orbitali molekularnych i dały wgląd w ich związek z ładunkiem centralnego jonu i rodzajem ligandów. W pracy [8] są wyniki badań nad dynamicznym efektem Jahn-Tellera dla jonów 3d pozostających w orbitalnych stanach tripletowych w otoczeniach kubicznych. Opublikowane wyniki dotyczą tak ważnych kwestii jak rola geometrii w strukturze stanów wzbudzonych, czy efektu Ham'a. W ostatniej grupie prac [9-15] do obliczeń habilitant wykorzystał kod komputerowy CASTEP, oparty na koncepcji funkcjonału gęstości (DFT) i metodach elektronowej teorii pasmowej. W tych obliczeniach, korzysta się z metody pseudopotencjału i elektronowych fal Blocha w postaci fal płaskich. Dlatego to podejście jest jakby z przeciwnego brzegu w stosunku do obliczeń molekularnych, gdzie jednoelektronowe funkcje falowe są wygaszane eksponentalnie w miarę oddalania się od jonów. To podejście pasmowe, pozwoliło autorowi na wykonanie szeregu ciekawych obliczeń, pozbawionych arbitralnych parametrów. Modelując wpływ ciśnienia poprzez zmianę odległości międzyjonowych, ustalił jak takie modelowanie wpływa na wielkość przerwy energetycznej i zmianę gęstości elektronowych. Wynikiem takich obliczeń jest także klarowniejszy obraz stanów domieszkowych i ich położenie względem przerwy energetycznej. Jest to szczególnie ważny mechanizm, bo warunkuje wiele własności transportowych i jest bardzo pomocny przy interpretacji widm optycznych. W tych badaniach na szczególną uwagę zasługuje próba mariażu teorii pola krystalicznego z obliczeniami pasmowymi. Taka kompozycja dwóch metod jest bardzo atrakcyjna, bo dostarcza spójnego obrazu jednocząstkowej struktury elektronowej wolnej od arbitralnych parametrów i w tej scenarii badane są wieloelektronowe stany układów domieszkowanych, tak ważne do zrozumienia ich optycznych własności.

Kończąc ocenę dorobku naukowego dra Mikhaila G. Brika stwierdzam, że habilitant podsumował w przejrzystej formie wyniki swoich prac, potrzebę czasochłonnych obliczeń struktury elektronowej i korzyści z wiedzy o materiałach, które są aktualnie badane eksperymentalnie w fizyce ciała stałego i dziedzinach pokrewnych. Przeglądając wyniki opublikowane przez habilitanta i jego międzynarodową aktywność, nie mam wątpliwości, że są to wyniki znaczące dla postępu w tych dziedzinach. Używany tak często zwrot „z pierwszych zasad”, każe mi przypuszczać, że habilitant włożył bardzo dużo wysiłku w obliczenia, by nie było zbyt wiele „wolnych parametrów”, które byłyby arbitralnie dobierane, by wymusić zgodność z doświadczeniem. W praktyce, stosując ten czy inny potencjał efektywny, istnieje szeroka gama możliwych do wyboru aproksymacji, w gąszczu których, stosując rozbudowane

kody komputerowe, można łatwo zgubić kontrolę nad mechanizmami fizycznymi, istotnymi dla wytłumaczenia obserwowanych przebiegów fizycznych w złożonych układach. Przeglądając pod tym kątem wyniki opublikowane przez dra Mikhaila G.Brika, widać, że habilitant uporał się z tymi zagrożeniami, prezentując przekonująco uzyskane wyniki w licznych wystąpieniach naukowych, oraz wielu publikacjach, w których jego udział jest wyraźnie widoczny a często dominujący. W dziedzinie dydaktycznej ma także bardzo bogate doświadczenie w nauczaniu i pokaźny dorobek akademicki. Dlatego wnoszę o dalsze postępowanie w sprawie nadania drowi Mikhailowi G.Brikowi stopnia doktora habilitowanego, przewidziane odnośnymi uregulowaniami prawnymi.



Prof. dr hab. Stanisław Kaprzyk