

dr hab. Ryszard Buczko  
Instytut Fizyki PAN  
Warszawa

Warszawa, 8 sierpnia 2014 r.

**Ocena osiągnięcia naukowego dr Małgorzaty Wierzbowskiej zatytułowanego: „Własności nowoczesnych materiałów otrzymane z pierwszych zasad oraz wkład w rozwój metod obliczeniowych”.**

Dr Małgorzata Wierzbowska w roku 1994 ukończyła Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu zdobywając dwa tytuły magistra w dziedzinach fizyki teoretycznej oraz fizycznych podstaw mikroelektroniki. Na tej samej uczelni obroniła doktorat z fizyki teoretycznej w 2000r. Promotorem był dr hab. Jan Wasilewski, natomiast tematyką doktoratu było badanie, przy użyciu metod z pierwszych zasad, absorpcji tlenu i potasu na powierzchni (0001) Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Od tej pory Pani dr Wierzbowska w swej działalności naukowej głównie zajmuje się wykorzystywaniem metod z pierwszych zasad opartych na teorii funkcjonału gęstości do badania własności różnych materiałów. Wiele z jej osiągnięć wynika z odbycia licznych staży zagranicznych co z pewnością przyczyniło się do jej znacznego rozwoju naukowego. Pani dr Wierzbowska przebywała na długoterminowych stażach na Ruhr-Universitaet Bochum (Lehrstuhl fuer Theoretische Chemie - dwukrotnie), na University of Lund (Theoretical Chemistry Department, Chemical Center), na Uniwersytecie w Wuerzburgu (Theoretische Physik), w Trinity College w Dublinie (Physics Department). W latach 2003-2007 przebywała również na czterech stażach w Triescie (Katedra Materii Skondensowanej SISSA, Katedra Materii Skondensowanej ICTP, w Katedra Materii Skondensowanej INFN, oraz Trieste University). Ostatnio pracowała na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego jako adiunkt naukowy. Pracowała tam z tak znanymi fizykami jak Prof. Stefano de Gironcoli, Prof. Erio Tosatti oraz Prof. Stefano Sanvito.

Pani dr Wierzbowska opublikowała 21 prac, w tym 17 po doktoracie. Jej prace mają 210 cytowań, a jej indeks Hirsch'a wynosi 7, co jest dobrym wynikiem na tym etapie kariery naukowej.

Do oceny habilitantka przedstawiła 12 swoich prac pod zbiorczym tytułem : „Własności nowoczesnych materiałów otrzymane z pierwszych zasad oraz wkład w rozwój metod obliczeniowych”. Prace te opublikowane zostały w czasopismach: Phys. Rev. B (5 prac), Cem. Phys., J. Phys. Cond. Matt., J. App. Phys., The European Phys. J. B, Phys. Chemistry Chem. Phys. Oraz Comp. Phys. Comm.. Dr Wierzbowska jest pierwszą autorką prawie wszystkich prac (poza dwoma), w tym jedyną autorką trzech prac. Prace zostały podzielone na trzy grupy: „Magnetyzm – półprzewodniki magnetyczne i

nanomagnetyzm”, „Nadprzewodnictwo – wkłady elektronowe, fononowe i od fluktuacji spinowych, parametry dla molekuł C60” oraz „Grafen”. W czwartej, ostatniej części autoreferatu autorka omówiła też swój wkład w rozwój metod obliczeniowych i programów komputerowych.

W pierwszej części dotyczącej magnetyzmu autorka omawia wyniki sześciu swoich prac. Dwie z nich związane są z badaniami własności półprzewodników półmagnetycznych (Ga,Mn)As oraz (Ga,Mn)N.

Wpisują się one w nurt badań teoretycznych prowadzonych z pierwszych zasad przez wielu autorów badających mechanizmy sprzężeń magnetycznych w półprzewodnikach półmagnetycznych. Pierwsza z prac (szczególnie wysoko cytowana) bada mechanizm sprzężenia ferromagnetycznego w (Ga,Mn)As oraz w (Ga,Mn)N. Jest jedną z pierwszych w których autorzy wyszli poza przybliżenie lokalnej spinowej gęstości (LSDA) stosowane wraz z poprawkami gradientowymi. Autorzy zaimplementowali nową wówczas (2004 rok) metodę o nazwie DFT+U, w której stosowane są poprawki na oddziaływanie Coulomb’a w silnie skorelowanych powłokach elektronowych  $d$  i  $f$ . Pozwoliło to na określenie stanu magnetycznego Mn w (Ga,Mn)As jako stanu  $d^5$  z dziurą sprzężoną antyferromagnetycznie. W wyniku całkowity moment magnetyczny wynosi  $4\mu_B$ . W przypadku (Ga,Mn)As autorzy uzyskali wynik zbliżony do uzyskiwanego poprzednio metodą LSDA – konfiguracja obsadzenia orbitali  $d$  jest bliska  $d^4$  (poprzednio  $d^{3.5}$ ). Uzyskano ferromagnetyczne sprzężenie w obu materiałach, sprzężenie ma charakter dalekozasięgowy, przenoszony przez dziury w GaAs oraz krótko zasięgowy w GaN, gdzie ważnym okazuje się mechanizm podwójnej wymiany. W następnej pracy dr Wierzbowska wraz ze współautorką badały kryształy półmagnetyczne z koncentracją domieszek Mn poniżej 1%. Uwzględniły one również pseudopotencjałową poprawkę na samoodziaływanie elektronu (pSIC) we wszystkich powłokach atomowych (nie tylko na powłoce  $d$  i  $f$ ). Przeprowadzona analiza gęstości stanów zrzutowanych na poszczególne atomy wyraźnie pokazała dużą delokalizację pochodzącą od manganu dziury z orbitalem o charakterze  $sp^3$  z dużym wkładem orbitali atomowych  $4p$  Mn.

Trzy następne prace dotyczą badania magnetyzmu w krzemie domieszkowanym renem. Ren jest elementem z tej samej kolumny układu okresowego co Mn. Ma niską magnetyzację jako domieszka podstawieniowa w krzemie, jednak okazało się że powoduje silne sprzężenie typu  $p-d$ . Autorzy szukali najkorzystniejszej energetycznie pozycji domieszki w kryształach. Badali również wpływ jej pozycji oraz pozycji w obecności wakansji na końcową siłę sprzężenia. Pokazali, że najkorzystniejsze energetycznie są pozycje podstawieniowe oraz tetragonalne międzywęzłowe. W obu wypadkach zbadali stany na poziomie Fermiego oraz wpływ domieszkowania na końcowy stan magnetyczny. Okazało się, że w przypadku Re podstawieniowego możliwe jest jedynie domieszkowanie typu  $n$ , a w przypadku Re międzywęzłowego typu  $p$ . W obu wypadkach uzyskali wynik diamagnetyczny. Autorka badała również energię formacji par atomów renu oraz wpływ tworzenia się par na własności magnetyczne kryształu. Przeprowadziła

symulacje Monte Carlo w modelu Isinga używając parametrów wymiany uzyskanych metodami z pierwszych zasad w celu wyznaczenia, zależnej od stopnia domieszkowania, temperatury krytycznej dla fazy ferromagnetycznej. Pokazała, że w układzie mogą tworzyć się domeny magnetyczne w temperaturze dużo niższej od krytycznej. Studiowanie tego układu zostało na koniec uzupełnione o zbadanie wpływu poprawek na samoodziaływanie elektronów na stany domieszek. Poprawki powiększają przerwę energetyczną w krzemie na tyle, że stany  $3d$  międzywęzłowego renu przesuwają się pod pasmo przewodnictwa. Efekt ten powoduje możliwość transferu ładunku od par międzywęzłowych do par podstawieniowych i redukcję własności magnetycznych. Autorka podaje sposób na uniknięcie tego typu sytuacji przez odpowiednie ko-domieszkowanie kryształu.

W ostatniej pracy z cyklu dotyczącego magnetyzmu autorka relacjonuje wyniki badań z pierwszych zasad własności magnetycznych nanodrutów utworzonych z Pd, Ni i Co. Magnetyczne nanodrutów mogą mieć potencjalne zastosowanie w układach elektronicznych jako elementy logiczne. Ich struktura atomowa może być stabilizowana wewnątrz innych nanostruktur. Autorzy badali efekty korelacji elektronowych opisywanych w metodzie DFT+U oraz pSIC na własności magnetyczne oraz transportowe nanodrutów. Pokazali, że uwzględnienie korelacji wpływa na redukcję kanałów przewodzenia po stanach  $d$  ale nie zmienia znacząco liczby wysoko przewodzących kanałów po stanach  $s$ . Pokazali też, że poprawne uwzględnienie korelacji zwiększa magnetyzację w nanodrutach Pd, za to nie ma wpływu na magnetyzację drutów Co i Ni.

W części autoreferatu dotyczącej nadprzewodnictwa autorka opisuje wyniki swoich badań nad nadprzewodnictwem jednorodnego gazu elektronowego. Autorzy przedstawionych prac analizują energię kondensacji gazu używając sformułowania teorii funkcjonału gęstości dla nadprzewodników i perturbacyjnego przedstawienia oddziaływań elektronowych. Dr Wierzbowska wraz z Jesper'em Kroghiem napisali i udostępili do publicznego użytku program komputerowy służący do parametryzacji funkcjonału korelacyjno-wymiennego. Program ten został wykorzystany przez dr Wierzbowską i współautora do zbadania zależności energii kondensacji od parametrów gęstości elektronowej oraz potencjału parowania. Okazało się, że energia kondensacji jest dodatnia prawie w całej przestrzeni konfiguracyjnej układu.

Dr Wierzbowska opisuje dalej w jaki sposób udało jej się usprawnić metodę liczenia sprzężenia elektron-fonon w pakiecie Quantum ESPRESSO i dzięki temu uzyskać nowe dane dotyczące temperatury krytycznej dla nadprzewodnictwa w niobie pod dużym ciśnieniem. Autorka zajmowała się również wpływem fluktuacji spinowych na nadprzewodnictwo. Wyprowadziła ona wzory na wkład od paramagnonów do metody DFT dla nadprzewodników. Wzory przetestowała dla przypadku prostych metali. Otrzymała temperatury krytyczne przy użyciu zarówno fononowej jak i paramagnonowej funkcji

spektralnej i pokazała, że uwzględnienie fluktuacji spinowych znacznie przybliży wyliczone temperatury krytyczne do wartości doświadczalnych. Na koniec tej części autoreferatu autorka przedstawia wyniki analizy korelacji elektronowych fulerenów  $C_{60}$ . Odpowiednio domieszkowane fulereny krystalizujące w sieci b.c.c. tworzą nadprzewodnik. Poprawny opis efektów korelacji elektronowych w tym materiale jest więc niezwykle istotny. Dr Wierzbowska brała udział w obliczaniu struktury multipletów fulrenów i otrzymała poprawiony opis struktury elektronowej w stosunku do struktur otrzymywanych poprzednio.

Trzecią część referatu zajmuje opis wyników prac dr Wierzbickiej dotyczących własności grafenu. Badała ona tworzenie się grafenu w procesie chemicznego osadzania w próżni na powierzchni SiC. W roli prekursora węglowego używany jest propan. Interesowała się ona jak taki proces przebiega, w jaki sposób przebiega proces dehydratacji warstwy grafenowej i jaka jest rola atmosfery argonu. Przeprowadzone zostały odpowiednie obliczenia kwantowo-chemiczne dla molekuł biorących udział w procesie na powierzchni 4H-SiC(0001). Przebadane zostały reakcje deprotonizacji propanu i jego kolcyjnych form oraz reakcję powierzchni SiC z wodorem, propanem i wszystkimi jego formami przejściowymi. Policzono bariery na dehydratację metodą ścieżek o najniższej energii całkowitej i określono efekt katalityczny powierzchni. Obliczenia pokazały dużą rolę powierzchni SiC jako katalizatora, pozwoliły prześledzić zachodzące reakcje chemiczne, pokazały również że powierzchnia zakończonej krzemem zostaje zatruta wodorem co uniemożliwia całkowite pokrycie jej czystą warstwą grafenu.

W ostatniej części autoreferatu Pani dr Wierzbowska opisuje swój wkład w rozwój metod obliczeniowych i programów komputerowych służących do obliczeń z pierwszych zasad. Pani Wierzbowska ma swój wkład do rozwoju takich znanych kodów jak GAMESS, MOLCAS, SIESTA i Quantum ESPRESSO. Między innymi: Dokonała implementacji metody LDA+U oraz pSIC do programu SIESTA. Usprawniła kod PHONON (do obliczeń oddziaływań elektron-fonon) w pakiecie Quantum ESPRESSO. Poprawiła sposób liczenia sił międzyatomowych w Quantum ESPRESSO. Napisała też seryjną wersję programu CHS służącą do liczenia wkładów do energii kondensacji dla stanu nadprzewodzącego w przybliżeniu gazu jednorodnego.

Podsumowując, Dr Wierzbowska przedstawiła wyniki prac dotyczących różnych materiałów takich jak: półprzewodniki półmagnetyczne, magnetyczne nanodruły, nadprzewodzący gaz elektronowy, fulereny i grafen. Własności tych materiałów obliczane były przy użyciu metod z pierwszych zasad. Dr Wierzbowska wykazała bardzo dobrą znajomość tych metod wnosząc jednocześnie swój wkład w rozwój ogólnie dostępnego oprogramowania. Wykazała też dobrą znajomość studiowanych zagadnień fizycznych jak i pokazała, że potrafi rozwiązywać stawiane przed nią problemy. Przedstawione prace są na wysokim poziomie i ukazały się w renomowanych czasopismach. Nie mam wątpliwości że zarówno dorobek

naukowy jak i zdobyte umiejętności spełniają kryteria potrzebne do nadania kandydatce stopnia doktora habilitowanego.

W rozporządzeniu ministra nauki i szkolnictwa wyższego dotyczącym kryteriów oceny kandydata poza dorobkiem naukowym, wymienione są jednak również inne kryteria oceny, między innymi takie jak: wygłaszanie referatów na konferencjach, kierowanie projektami naukowymi, działalność dydaktyczna i organizatorska. Z żalem muszę zauważyć, że dr Wierzbowska nie podała w swoim autoreferacie żadnej listy wymieniającej tego typu działalność. Trudno przypuszczać by kandydatka w czasie swojej działalności nie uczestniczyła w międzynarodowych konferencjach (w jednym miejscu referatu wspomina o swoim wystąpieniu na szkole letniej w Vitri Sul Mare) jednak brak wymienionej działalności dydaktycznej i organizacyjnej pozwala przypuszczać, że nie miała ona okazji w tych dziedzinach się wykazać. Biorąc jednak pod uwagę bardzo dobry dorobek naukowy przedstawiony przez habilitantkę uważam, że wspomniane niedostatki nie mają dużego znaczenia. Wnioskuje więc o dopuszczenie jej do dalszych etapów postępowania.



Ryszard Buczko