



Mens agitat molem

Zakład Teorii Fazy Skondensowanej UMCS
Condensed Matter Theory Department

ul. Radziszewskiego 10
20 031 Lublin, POLAND

<http://kft.umcs.lublin.pl/ztfs> fax: (+48 (0)81) 537 61 90

Prof. dr hab. Karol Izidor Wysokiński tel.(081)5376236 e.mail: karol@tytan.umcs.lublin.pl

Lublin dn. 23 kwietnia 2012 r.

Opinia o pracy habilitacyjnej

„Badanie z pierwszych zasad silnie skorelowanego elektronowo układu”

oraz dorobku naukowym i organizacyjnym

pani dr inż. Urszuli Danuty Wdowik

Pani Urszula D. Wdowik studiowała fizykę techniczną na Wydziale Fizyki i Techniki Jądrowej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie i uzyskała tytuł zawodowy magistra inżyniera w 1991 r. Jej dalsza kariera naukowa związana jest z Uniwersytetem Pedagogicznym w Krakowie, uczelnią, która wcześniej znana była jako Wyższa Szkoła Pedagogiczna i Akademia Pedagogiczna. Stopień naukowy doktora nadała jej Rada Wydziału Fizyki i Techniki Jądrowej AGH uchwałą z dnia 15 czerwca 1998 roku na podstawie rozprawy doktorskiej „*Emission Mössbauer spectroscopy in rutile single crystals*” wykonanej pod kierunkiem prof. Krzysztofa Ruebenbeneta.

Opiniowana praca habilitacyjna składa się z monotematycznego cyklu sześciu publikacji naukowych, które ukazały się drukiem w latach 2007-2011. Cztery prace opublikowano w Phys. Rev. B, jedną w J. Phys. Chem. Sol. i jedną w J. Phys. Condensed Matter. Jedna praca jest autorstwa tylko pani Wdowik, a pozostałe są publikacjami współautorskimi, ale we wszystkich pani Wdowik jest pierwszym, a także korespondencyjnym autorem. Do wniosku załączone są oświadczenia współautorów prac, którzy podkreślają wiodącą rolę habilitantki w powstaniu wspólnych publikacji. Należy podkreślić, że są to solidne i obszernie publikacje. Wszystkie one poświęcone są jednemu związkowi, a mianowicie tlenkowi kobaltu (II) CoO, według wcześniejszych zasad nazewnictwa chemicznego zwanemu tlenkiem kobaltawym. Do badania elektronowych i fononowych właściwości tego materiału habilitantka stosuje metody obliczeń z pierwszych zasad i ogólnie znane kody numeryczne.

CoO jest materiałem o silnych korelacjach elektronowych, a jednocześnie jako tlenek oraz związek chemiczny zawierający promieniotwórczy kobalt jest często silnie zdefektowany. Zarówno korelacje elektronowe jak i defekty, zarówno tlenowe oraz te w podsięci kationowej, istotnie modyfikują właściwości materiału.

W pracach wchodzących w skład habilitacji autorka analizuje widma elektronowe i fononowe kryształów idealnych i z defektami różnego pochodzenia. Do obliczeń stosuje metodę funkcjonału gęstości (DFT) i uogólnione przybliżenie gradientowe (GGA) uzupełnione o wyraz opisujący krótkozasięgowe odpychanie kulombowskie, zwykle określane mianem U-Hubbarda. Jest to właściwa technika badawcza zdolna opisać istotne szczegóły badanych układów z korelacjami.

Do opisu defektów stosuje autorka metodę superkomórek. Ograniczenia wynikające z tej metody do małej koncentracji domieszek są dobrze spełnione w realnych materiałach i nie ma tu konieczności stosować bardziej zaawansowanych technik uwzględniania nieporządku jak np. metoda CPA. Widma fononowe obliczane są na podstawie sił działających na jony obliczonych z pierwszych zasad w przybliżeniu liniowym rachunku zaburzeń, zwanym przybliżeniem (a nawet szumnie twierdzeniem) Feynmana-Hellmanna. Widma fononowe i gęstości stanów obliczono wykorzystując oryginalną metodę i programy autorstwa prof. K. Parlińskiego, współautora czterech prac wchodzących w zakres habilitacji.

Nie ma wątpliwości, że znakomity poziom naukowy tych publikacji wiele zawdzięcza temu współautorowi. Oświadczenie prof. Parlińskiego na temat jego wkładu do wspólnych publikacji, ale także autorski raport pani dr Wdowik przekonują, że jej wkład do wspólnych prac jest wiodący oraz, że jest ona w pełni ukształtowanym badaczem znakomicie panującym nad warsztatem naukowym oraz tematyką badawczą. Po dokładnym przeczytaniu wszystkich publikacji i raportu autorstwa dr Wdowik nie mam wątpliwości, że omawiany monotematyczny zbiór publikacji spełnia wymagania stawiane rozprawom habilitacyjnym.

Dorobek naukowy nie wchodzący w skład habilitacji też oceniam bardzo pozytywnie. W początkowym okresie kariery pani U. Wdowik były to głównie badania związane z dyfuzją domieszek w strukturze rutyli (TiO_2), opis frakcji bezodrzutowej w zjawisku Mössbauera oraz współdziałanie w konstrukcji spektrometru mössbauerowskiego. Po doktoracie pani U. Wdowik zajęła się już głównie obliczeniami z pierwszych zasad, choć zawsze korzystała z wiedzy na temat zjawiska Mössbauera, a w ostatnim okresie znowu szczególnie intensywnie

współpracuje w kolegami zajmującymi się tym zjawiskiem i wykonuje obliczenia *ab initio* dla celów porównań z pomiarami mössbauerowskimi czy kalibracji tych ostatnich.

Dr Wdowik jest już wysokiej klasy specjalistką od obliczeń z pierwszych zasad. W jej dorobku poza habilitacją znajdują się obliczenia właściwości m.in. LaMnO_3 , CsNiF_3 , BeO , Re_2O_3 , MnO , AlN , MgAl_2O_4 . Współpracuje z wieloma grupami badawczymi w Kraju i za granicą. W tym ostatnim przypadku należy wymienić szwajcarskie laboratoria EMPA (Dübendorf), Institut Lane-Lngevin (Grenoble – Francja), Akademię Nauk Republiki Czeskiej, Uniwersytet Wiedeński, Concordia University (Kanada), Purdue University (USA). W materiałach habilitacyjnych nie znalazłem szczegółowych informacji na temat form tej współpracy. W jej wyniku pojawiło się kilka wspólnych publikacji.

Pani dr Wdowik była kierownikiem czesko-polskiego projektu badawczego w latach 2010-2011 i jest wykonawcą w szwajcarsko-polskim projekcie na lata 2011-2014. Wcześniej kierowała jednym projektem MNiSzW w latach 2005-2007. Ośmiokrotnie wygłaszała referaty na krajowych i międzynarodowych konferencjach naukowych. Nie wiem jednak czy którykolwiek z nich był wykładem na zaproszenie, gdyż nigdzie nie znalazłem informacji o tym. Trzykrotnie była współorganizatorem konferencji naukowych. Jest recenzentem szeregu czołowych czasopism fizycznych.

Dr Urszula Wdowik prowadziła ćwiczenia laboratoryjne i audytoryjne oraz wykłady z fizyki ogólnej oraz różnych technik informatycznych (głównie programowania). Współtworzyła programy nauczania dla kierunków: *Fizyka z elementami inżynierii materiałowej* oraz *Edukacja techniczno-informatyczna*. Aktywnie uczestniczyła w Festiwalach Nauki. W latach 2003-2004 pełniła funkcję zastępcy Dyrektora Instytutu Techniki AP. Dotychczas była promotorem łącznie 11 licencjatów, inżynierów i magistrów.

Krótką i z konieczności pobieżną charakterystykę najważniejszych wyników pracy habilitacyjnej przeprowadzę w kolejności w jakiej autorka załączyła te prace. I tak tematem pracy [E1] są obliczenia *ab initio* metodą DFT+U struktury tlenku CoO . Uwzględnienie korelacji elektronowych pozwoliło stwierdzić, że jest to izolator typu charge-transfer, a nie jak sądzono izolator Motta-Hubbarda. Uzyskano też bardzo dobrą zgodność z doświadczeniem szeregu właściwości tego materiału m.in. przerwy energetycznej oraz momentu magnetycznego na jonach kobaltu oraz wkładu sieciowego do ciepła właściwego. Wydaje się, że sukces tej pracy, która odbiła się dość szerokim echem w literaturze światowej i już doczekała się 16 cytowań sprawiły, że autorka zajęła się szczegółowo badaniem tego materiału.

W kolejnej pracy analizowała właściwości CoO pod ciśnieniem. Pokazała, że przemiana izolacyjnej fazy antyferromagnetycznej tzw. AFII (w której kolejne płaszczyzny ferromagnetyczne są uporządkowane antyferromagnetycznie) do fazy metalicznej związana jest ze wzrostem szerokości pasm i zmniejszającą się rolą oddziaływań kulombowskich. To ostatnie przy założeniu braku zmienności U wraz z ciśnieniem.

W pozostałych pracach habilitacji autorka badała zdefektowany tlenek kobaltowy rozważając wakansje w podsieci kobaltu oraz domieszki Fe, Al i In w towarzystwie wakansji. Badała właściwości elektronowe i sieciowe porównując, gdzie to możliwe uzyskane wyniki z doświadczeniem. Istnienie w tym materiale domieszek żelazowych w sposób naturalny sugeruje doświadczalne ich badanie techniką Mössbauera [E4]. Tak też się stało i wyniki obliczeń dla domieszki żelaza w różnym otoczeniu oraz w zależności od stopnia utlenienia zostały przedyskutowane w kontekście pomiarów mössbauerowskich jakie autorka wykonała we współpracy z prof. K. Ruebenbauerem, i które opublikowano w Phys. Rev. B 76, 155118 (2007).

Ważną cechą prac pani dr Wdowik jest to, że często powstają w ścisłej współpracy z grupami eksperymentalnymi. Owocuje to przekonującymi argumentami i sprawia, że wyniki badań nie są oderwane od rzeczywistości fizycznej. Uwaga ta dotyczy także prac nie wchodzących w zakres habilitacji.

Całkowity dorobek naukowy pani dr Wdowik jest solidny i trwały. Składa się na to dobry warsztat badawczy, dokładna analiza uzyskanych wyników oraz wspomniane wcześniej porównywanie z doświadczeniem. Pod względem liczbowym dorobek ten jest też przyzwoity. W okresie 20 lat od doktoratu opublikowała ponad 30 prac w czasopismach z listy filadelfijskiej, co daje średnio ponad 1,5 publikacji na rok. Prace te zamieszczone są w bardzo dobrych czasopismach specjalistycznych i są dobrze cytowane w literaturze przedmiotu. Łącznie liczba cytowań wynosząca blisko 180, a bez autocytowań prawie 130 to może nie są liczby imponujące, ale z pewnością przyzwoite na tym etapie kariery.

Reasumując stwierdzam, że zarówno praca habilitacyjna jak i pozostały dorobek naukowy są na dobrym poziomie naukowym. Dorobek dydaktyczny i organizacyjny należy ocenić przynajmniej tak samo. Dodatkowo habilitantka posiada już wymierny dorobek w kształceniu kadry. Wszystko to sprawia, że z pełnym przekonaniem stwierdzam, że pani dr Urszula Danuta Wdowik spełnia wymagania ustawowe i zasługuje na przyznanie jej stopnia naukowego doktora habilitowanego. Wniosek taki popieram bez zastrzeżeń.

