

prof. dr hab. Antoni C. Mituś
Katedra Fizyki Teoretycznej
Politechnika Wrocławska
antoni.mitus@pwr.edu.pl

Wrocław, 11 maja 2018

Opinia o rozprawie habilitacyjnej dr Wiesława Zbigniewa Polaka
„Symulacje powstawania i analiza struktury wewnętrznej klastrów Lennard-Jonesa”
oraz o Jego dorobku naukowym, dydaktycznym i organizacyjnym

Habilitant

Dr Wiesław Zbigniew Polak uzyskał stopnie naukowe magistra fizyki oraz doktora nauk fizycznych odpowiednio w latach 1986 oraz 1997 na Uniwersytecie Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie. Od roku 1989 pracuje w Politechnice Lubelskiej, obecnie jako adiunkt.

Ocena osiągnięcia naukowego

Dr Polak przedstawił do oceny cykl dziesięciu prac tworzących osiągnięcie naukowe zatytułowane „Symulacje powstawania i analiza struktury wewnętrznej klastrów Lennard-Jonesa” w związku z ubieganiem się o stopień naukowy doktora habilitowanego. Tworzą one spójną całość połączoną wspólną tematyką.

Prace składające się na osiągnięcie naukowe zostały opublikowane w latach 2003 – 2016 w bardzo dobrych i dobrych czasopismach o zasięgu światowym: *Physical Review B* (2 prace), *Physical Review E*, *Europhysics Letters* (wycenione w wykazie czasopism MNiSW na 35 punktów), *Chemical Physics Letters* i *Journal of Crystal Growth* (25 punktów), *European Physical Journal D* (2 prace), *Crystal Research and Technology*, oraz *Computational and Theoretical Chemistry* (20 punktów). We wszystkich pracach z wyjątkiem pracy H1 Habilitant jest jedynym autorem co dobitnie podkreśla Jego samodzielność i dojrzałość naukową. W załączonym oświadczeniu współautor pracy H1, prof. dr hab. A. Patrykiewicz, ocenił swój do niej wkład na 15%.

Ponieważ wszystkie prace zostały opublikowane w bardzo dobrych i dobrych czasopismach w wyniku wnikliwego procesu recenzji, nie będę ich szczegółowo streszczać, natomiast przedstawię ich główne cele, logikę, oraz najważniejsze osiągnięcia. Pragnę podkreślić, że dobrze napisany Autoreferat Habilitanta udanie podsumowuje stosowane metody oraz najważniejsze wyniki osiągnięcia naukowego.

Cykl prac dotyczy analizy końcowej struktury klastrów utworzonych z układu atomów oddziałujących ze sobą za pomocą potencjału Lennarda-Jonesa, powstałej w wyniku symulacji metodą Monte Carlo procesów schładzania/podgrzewania układu atomów albo

wzrostu początkowego klastra. Otrzymane przez Habilitanta wyniki, mające w cyklu prac charakter poznawczy, mogą mieć zastosowania w nanotechnologii, związane z inżynierią molekularną nanostruktur z określoną lokalną strukturą typu krystalicznego, jak również w nanobiologii, związane z przepływem w nano-kanalach. Tematykę cyklu prac uważam za aktualną.

Analiza chwilowej lokalnej struktury klastra składającego się z od kilkudziesięciu do kilku tysięcy atomów jest zagadnieniem typu rozpoznawania obrazów. Pełny opis struktury klastra wymaga wprowadzenia inwariantów (względem grupy obrotów w trzech wymiarach) utworzonych z tensorowych parametrów (momenty multipolowe rozkładu masy). W efekcie fluktuacji termicznych zagadnienie rozpoznawania struktury w wielowymiarowej przestrzeni momentów multipolowych przybiera charakter probabilistyczny (podejście tego typu zostało zaproponowane w pracach A.Z. Pataszyńskiego i recenzenta). Probabilistyczny aspekt klasyfikacji struktur jest zazwyczaj ignorowany, a wielowymiarowy układ inwariantów redukowany do jednego lub kilku parametrów. Habilitant zaproponował w pracy H1 nowe oryginalne podejście w którym typ idealnej (niefluktuującej) struktury (fcc, hcp, bcc, ikosaedrycznej, dekaedrycznej) klastra zbudowanego wokół wybranego atomu jest jednoznacznie klasyfikowany za pomocą kilku geometrycznych charakterystyk wielościanu koordynacyjnego (WK). Probabilistyczny aspekt rozpoznawania jest pominięty, ale Habilitant zdaje sobie sprawę z tego ograniczenia metody. Metoda WK okazała się bardzo przydatna w dalszej analizie, dlatego też uważam, że praca H1 wnosi istotny wkład do metodologii rozpoznawania lokalnej struktury klastrów atomów.

Rezultaty mojej analizy wyników zawartych w cyklu prac były dla mnie przyjemnym zaskoczeniem. A mianowicie, z gąszczu bardzo szczegółowych wyników, których nie sposób tutaj wyliczać, wyłaniają się pewne prawidłowości oraz proste schematy klasyfikacji struktur klastrów. Prostota wyników badań naukowych jest pożądanym efektem – mam nadzieję, że Habilitant wkracza na drogę, która być może poprowadzi Go w takim kierunku. W tym sensie wyróżnia się praca H6, w której pokazano, że wewnętrzna struktura klastrów zestalonych przez chłodzenie, składających się z kilkuset atomów, daje się sklasyfikować do trzech dobrze zdefiniowanych grup. Podobnie, strukturę klastra rosnącego z idealnego zarodka klasyfikuje do jednej z sześciu grup (praca H2); ważne przy tym jest podanie uzasadnienia niedużej liczby tych grup. Inny mocny wynik, pochodzący z pracy H3, wiąże analitycznie temperaturę krzepnięcia z rozmiarem klastra N ; ekstrapolacja prowadzi, w granicy termodynamicznej, do niezłego oszacowania temperatury zestalenia argonu w symulacjach komputerowych.

Za szczególnie ważne uważam to, że Habilitant nie ogranicza się jedynie do przeprowadzenia rzetelnej analizy struktury, ale próbuje na jej podstawie stawiać hipotezy dotyczące mechanizmów fizycznych. W pracy H7 strukturę warstwową ciekłych klastrów wiąże z pułapkowaniem centralnego atomu. W cyklu prac dotyczących zagadnienia RGS (struktury fcc/hcp) interpretuje wybrane wyniki (prace H2, H4, H5, H9) jako konsekwencję procesów kinetycznych. Pewien niedosyt wywołuje tu odwoływanie się Autora do argumentów związanych z energią a nie z innymi potencjałami termodynamicznymi.

Równie ważne co liczne wyniki ilościowe zaprezentowane w cyklu prac są obserwacje o charakterze jakościowym jak, na przykład, lokalizacja jednostki ikosaedrycznej w zależności od rozmiaru ciekłego klastera (praca H7), lokalizacja zarodka wewnątrz (a nie na powierzchni) krzepnącego klastera (H8), powiększanie się przedziału temperatur w którym ma miejsce dynamiczne współistnienie struktur ciekłego klastera przy zmniejszaniu jego rozmiarów (praca H3). Do tej klasy wyników zaliczam demonstrację faktu zmiany struktury zarodka z rozgałęzionej na zwartą przy przekroczeniu przez zarodek pewnego rozmiaru (H8). Na uwagę zasługuje odkrycie nowej struktury poliikosaedrycznej w klasternych zestalonych przez chłodzenie (prace H1, H2, H6, H9).

Za interesujący uważam wkład Habilitanta w rozwiązywanie zagadnienia konkurencji struktur fcc/hcp przy wzroście kryształu. Choć nie kończy się on rozwiązaniem tego problemu, to rozwinięte przez Habilitanta metody pozwalają na systematyczną charakteryzację procesów pojawiania się defektów o strukturze odbiegającej od fcc w początkowych fazach wzrostu struktury fcc z różnych zarodków (prace H2, H3, H4, H5, H10).

Zauważę, że badanie struktury, dynamiki czy też kinetyki oddzielnych klasternych siłą rzeczy nie daje odpowiedzi na pytania związane z tymiż efektami w rosnących kryształach. W tym kontekście godnym uznania jest wynik pracy H8 w której Habilitant pokazuje, że rozmiar stabilnego zarodka otrzymany przy badaniu pojedynczego klastera dobrze zgadza się z rozmiarem otrzymanym przy symulacji krzepnięcia przechłodzonej cieczy Lennarda-Jonesa. Ten mocny wynik, mający po części charakter metodologiczny, wskazuje na potencjalną możliwość stosowania metod rozwijanych przez Habilitanta do wnioskowania o procesach zachodzących w cieczach na podstawie wyników dla małych klasternych.

Podsumowując uważam, że cykl prac Habilitanta wprowadza dobrej jakości, wymagający standard badań lokalnej struktury klasternych atomowych. Trzon cyklu prac stanowią osiągnięcia naukowe stanowią szczegółowe badania struktury, ale Habilitant nie stroni od prób trudnej interpretacji fizycznej obserwowanych efektów strukturalnych.

Ocena dorobku naukowego

Na całkowity dorobek naukowy Habilitanta składają się 24 prace, z czego 17 z bazy JRC; pozostałe prace to przede wszystkim materiały konferencyjne. Prace te były cytowane 122 razy, indeks $h = 7$ (baza Scopus z 11 kwietnia 2018). Według oświadczenia Habilitanta sumaryczny *impact factor*, zgodnie z rokiem opublikowania wynosi 29,00, zaś sumaryczna liczba punktów z listy MNiSW z roku 2016 to 445. Te dane bibliometryczne są zadowalające, adekwatne do aktualnego rozwoju naukowego Habilitanta.

Przed uzyskaniem stopnia doktora był współautorem czterech prac w dobrych czasopiśmie z bazy JRC, w tym *J. Appl. Phys* oraz *J. Crystal Growth*, oraz współautorem trzech prac spoza bazy JRC. W pierwszej fazie swojej kariery naukowej zajmował się fizyką teoretyczną (praca magisterska); godny podkreślenia jest fakt samodzielnej publikacji z dziedziny mechaniki kwantowej w *J. Appl. Phys*. Dorobek naukowy uzyskany w drugiej fazie rozwoju naukowego ma charakter monotematyczny i jest związany z modelowaniem klasternych metodami fizyki statystycznej (głównie symulacje Monte Carlo). W tym czasie Habilitant wygłosił cztery

komunikaty konferencyjne (wszystkie w Polsce), był współautorem pięciu plakatów (z tego trzy na konferencjach w Polsce).

Po uzyskaniu stopnia naukowego doktora oprócz prac H1- H10 wchodzących w skład osiągnięcia naukowego Habilitant opublikował trzy prace z bazy JRC, z czego dwie w dobrych czasopismach (*J. Crystal Growth* i *J. Phys.:Condens. Matter*). Wygłosił cztery komunikaty na międzynarodowych i krajowych konferencjach (z czego 3 w Polsce). Brał aktywny udział (plakaty) w kilkunastu konferencjach, z czego większość poza granicami Polski. Wyraźny niedosyt pozostawia fakt, że ostatnie wystąpienie konferencyjne miało miejsce w roku 2013, a prezentacja plakatu - w roku 2014. Ponieważ ostatnia publikacja H10 wchodząca w skład osiągnięcia naukowego pochodzi z roku 2016, niepokojąca nieobecność Habilitanta na międzynarodowych konferencjach musiała mieć inne przyczyny niż brak postępu w badaniach naukowych.

Ważną rolę w ocenie dorobku naukowego Habilitanta oraz Jego samodzielności naukowej odgrywa fakt, że był on kierownikiem (i jedynym wykonawcą) grantu KBN.

Współpraca międzynarodowa oraz krajowa Habilitanta jest bardzo skromna. Nawiązał współpracę z University of Victoria (Wellington, Nowa Zelandia), której efektem była wspólna publikacja w *J. Phys.: Condens. Matter*. Dr Polak korzystał z danych udostępnionych mu przez grupę van de Waala, ale nie zaowocowało to wspólną publikacją. Odbył półroczny krajowy staż naukowy na Wydziale Chemii UMCS.

Podsumowując, całkowity dorobek naukowy Habilitanta oceniam jako skromny, ale wystarczający do starania się o stopień naukowy doktora habilitowanego.

Ocena działalności organizacyjnej, dydaktycznej oraz popularyzatorskiej

Działalność organizacyjna Habilitanta sprawia dobre wrażenie. Brał udział w pracach komitetu organizacyjnego międzynarodowej konferencji, oraz był jednym z redaktorów jej materiałów konferencyjnych. Pełnił funkcję sekretarza technicznego Polskiego Towarzystwa Wzrostu Kryształów, obowiązkami kierownika Zakładu Fizyki Stosowanej Instytutu Fizyki Politechniki Lubelskiej, był przewodniczącym komisji rewizyjnej Lubelskiego Oddziału PTF. Recenzował kilkanaście prac w czasopismach o zasięgu międzynarodowym, w tym 6 w *Materials Chemistry and Physics* z IF ponad 2.0.

Działalność dydaktyczną dra Polaka oceniam jako zadowalającą. Prowadził wykłady, laboratoria oraz ćwiczenia rachunkowe z fizyki oraz innych przedmiotów związanych z modelowaniem komputerowym w nauce i technice, programowaniem użytkowym, informatyką oraz diagnostyką medyczną. Godna podkreślenia jest Jego organizacyjna działalność w ramach laboratorium fizycznego. Wziął udział w konferencji dydaktycznej *Physics Teaching in Engineering Education* (Wrocław, 2009), napisał artykuł do jej materiałów konferencyjnych. Habilitant był promotorem kilku prac dyplomowych i magisterskich.

Działalność popularyzatorska dra Polaka jest skromna. Na uznanie zasługuje fakt zainicjowania i dwukrotnego współprowadzenia warsztatów dla młodzieży gimnazjalnej w

ramach Lubelskiego Festiwalu Nauki. Wystąpił na Zjeździe Fizyków Polskich (2011) ze swoją interpretacją domniemanego efektu uderzenia pioruna kulistego.

Dr Polak otrzymał Srebrny Krzyż Zasługi za osiągnięcia w pracy naukowej, oraz (trzykrotnie) nagrodę Rektora Politechniki Lubelskiej za osiągnięcia w działalności naukowej.

Podsumowanie

Jestem zdania, że przedstawione do recenzji osiągnięcie naukowe spełnia wymagania ustawowe i zwyczajowe pozwalające starać się o stopień naukowy doktora habilitowanego. Pozytywnie oceniam całość dorobku naukowego Habilitanta oraz Jego działalność organizacyjną i dydaktyczną. Dlatego też z całym przekonaniem popieram wniosek o nadanie dr. Wiesławowi Z. Polakowi stopnia naukowego doktora habilitowanego.

A. C. M.!