

Ocena dorobku naukowego i rozprawy habilitacyjnej pt.,,Symulacje komputerowe własności sprężystych wybranych układów modelowych i poszukiwanie mechanizmów auksetyczności” dr Konstantego Tretiakova z Instytutu Fizyki Molekularnej PAN w Poznaniu

Dziedziną naukową reprezentowaną przez dr Tretiakova jest fizyka statystyczna i fizyka miękkiej materii. Podstawowym narzędziem pracy kandydata są symulacje komputerowe. Głównym zagadnieniem badawczym, które często występuje w jego pracach są własności elastyczne modelowych układów fizycznych (twarde dyski, miękkie dyski, twarde sfery, miękkie sfery, pentametry etc.). Tym zagadnieniem zajmuje się od kilkunastu lat; jego pierwsza publikacja na ten temat została opublikowana w 1996 roku. Z lektury rozprawy habilitacyjnej i publikacji wynika, że dr Tretiakov jest specjalistą w tym zakresie badań naukowych, chociaż dodać należy, że Jego specjalność jest bardzo wąska.

Dr Tretiakov opublikował 28 publikacji w tym 22 po doktoracie. Dwadzieścia dwie prace zostały opublikowane w czasopismach z listy filadelfijskiej. Publikuje w takich czasopismach jak: Journal of Chemical Physics, Journal of Non-Crystalline Solids, Journal of Physics Condensed Matter. Jest także współautorem pracy w Nature, Soft Matter, Journal of Physical Chemistry A i B. Te ostatnie prace pochodzą ze stażu podoktorskiego w USA. Publikacje dr Tretiakova są cytowane około 30-40 razy rocznie |(dane z ostatnich dwóch lat 2008-2009). Dr Tretiakov był autorem lub współautorem 18 zgłoszeń konferencyjnych oraz wygłosił 11 referatów i seminariów. Brał udział w 6-ciu grantach, w tym w jednym z nich był kierownikiem. Wykonał 6 recenzji publikacji. Podsumowując: Formalnie dorobek naukowy dr Tretiakova jest wystarczający do habilitacji.

Dr Tretiakov odbył 2 staże zagraniczne w USA w latach 2007-2010 i we Włoszech w latach 2002-2004 i 2005-2006. W latach 2002-2004 oraz w latach 2005-2006 przebywał w Triescie w Centrum Fizyki Teoretycznej Abdusa Salama w grupie prof. Scandolo, gdzie pracował nad przewodnictwem cieplnym stałego argonu. W latach 2007-2010 odbył staż na Northwestern University w grupie prof. Grzybowskiego, gdzie pracował nad układami samo-organizującymi się,

adsorbacją nanocząstek i zjawiskiem fotoprzewodnictwa w warstwach nanocząstek. Z pobytu u prof. Scandolo przywiózł 2 publikacje, a z grupy prof. Grzybowskiego tylko cztery prace. Dobry teoretyk w tej ostatniej grupie łatwo może osiągnąć wynik 6 prac rocznie. Jeden z moich uczniów doc. dr hab. Marcin Fiałkowski był przez 3 lata w grupie prof. Grzybowskiego i przywiózł ze stażu 26 publikacji (w tym dwie prace w Science). Przy dużej liczbie eksperymentów w tej grupie (i co za tym idzie publikacji), fizyk teoretyk jest w stanie wnieść wkład w wyjaśnienie wielu zjawisk i zostać w ten sposób współautorem wielu publikacji. W sumie z 4 lat staży podoktorskich dr Tretiakov przywiózł ze sobą tylko 6 prac.

Nie znalazłem w autoreferacie informacji o wykładach dla studentów, co wynika z czysto-naukowego charakteru pracy w Instytucie Fizyki Molekularnej PAN. W zamian Dr. Tretiakov opiekował się nieformalnie dwoma doktorantami w latach 2000-2002 oraz w latach 2005-2006.

Dorobek i kariera naukowa dr Tretiakova spełniają z punktu widzenia formalnego wymagania stawiane kandydatom do stopnia naukowego doktora habilitowanego, chociaż nie jest to dorobek wybitny. Zabrakło mi listów rekomendacyjnych od dwóch opiekunów staży podoktorskich: prof. Scandolo oraz prof. Grzybowskiego oraz od profesora Wojciechowskiego (promotora pracy doktorskiej kandydata). Pomimo, iż formalnie nie ma takiego wymogu, to jest dobrą praktyką by o niezależne opinie pytać osoby związane ze środowiskiem, w którym pracuje lub pracował kandydat na stopień doktora habilitowanego.

Rozprawa habilitacyjna dr Tretiakova pt. „Symulacje komputerowe własności sprężystych wybranych układów modelowych i poszukiwanie mechanizmów auksetyczności” jest dość bliska tematyce podjętej w jego doktoracie. Formalnie nie ma wymogu by rozprawa habilitacyjna znacznie odchodziła od tematu pracy doktorskiej i magisterskiej, ale jest to dobrą praktyką w fizyce. Rozprawa habilitacyjna została oparta na dziewięciu pracach oryginalnych opublikowanych w latach 2003-2009. W 7-miu pracach dr Tretiakov jest pierwszym autorem, a w dwóch drugim. Tylko w jednej pracy dr Tretiakov jest jedynym autorem. W 8-miu pracach figuruje również prof.

Wojciechowski promotor pracy doktorskiej dr Tretiakova. Wszyscy współautorzy dostarczyli, zgodnie z wymogami, listy opisujące ich wkład do wspólnych prac. Profesor Wojciechowski napisał, że w dwóch pracach (w Journal of Chemical Physics i Physical Review E z 2003 roku) zasugerował temat i został pierwszym autorem. Nie potrafię ocenić na podstawie listu profesora Wojciechowskiego na ile temat podjęty w rozprawie wyrósł z inicjatywy i pomysłów dr Tretiakova. Z faktu otwarcia przewodu habilitacyjnego w macierzystym Instytucie dr. Tretiakova i prof. Wojciechowskiego wnioskuję, że wkład kandydata w prace stanowiące podstawę rozprawy habilitacyjnej został uznany przez środowisko Instytutu za wiodący, pomimo niejasnego (dla recenzenta) oświadczenia prof. Wojciechowskiego.

W rozprawie habilitacyjnej dr Tretiakov omawia własności elastyczne kilku układów modelowych takich jak: twarde dyski, twarde kule, miękkie dyski, polidispersyjne układy miękkich dysków, twardych dimerów, tetramerów, pentamerów i heptametrow. Autor wykonał wiele symulacji komputerowych i wyznaczył współczynnik Poissona (stosunek odkształcenia poprzecznego do podłużnego) dla tych układów. Niektóre z nich wykazują zjawisko auksetyczności. Układ auksetyczny ściskany w jednym kierunku ulega ściskaniu także w kierunku poprzecznym. Współczynnik Poissona takiego układu jest ujemny. Współczynnik Poissona stanowi główne zagadnienia naukowe opisane w rozprawie habilitacyjnej. Poniżej opiszę w moim przekonaniu najciekawszy wynik rozprawy.

W temperaturze $T=0$ (granica statyczna) można ściśle policzyć współczynnik Poissona dla układu gęsto upakowania twardych dysków. Autor otrzymał wartość równą $1/3$. Z drugiej strony w granicy gęstego upakowania dla dowolnej niezerowej temperatury Autor otrzymał z symulacji wynik 0,13. Różnica między tymi dwoma wynikami oznacza, że ruchy termiczne prawie trzykrotnie zmniejszają współczynnik Poissona w dowolnej niezerowej temperaturze. Z twardymi dimerami jest ten sam problem: graniczna wartość współczynnika Poissona przy gęstości dimerów dążącej do gęstości maksymalnego upakowania dla dowolnej niezerowej temperatury różni się o

rzęd wielkości od tej wartości dla gęstego upakowania w $T=0$. Ta skokowa zmiana współczynnika Poissona nie została wyjaśniona przez Autora rozprawy. Wiadomo, że wiele własności twardych ciał jest przybliżanych przez potencjał miękki $1/r^n$ przy n dążącym do nieskończoności. Jednak dla dużych n przy T dążącym do zera współczynnik Poissona dla miękkich dysków dąży do wartości $1/3$ a nie $0,13$. Ten wynik habilitacji także nie został wyjaśniony. Znamy liczby, ale nie rozumiemy fizycznego mechanizmu odpowiedzialnego za te różnice we współczynniku Poissona. Czy na pewno granica gęstego upakowania przy niezerowej temperaturze jest wzięta poprawnie? W moim odczuciu Autor nie dokończył swojej pracy habilitacyjnej, ponieważ nie zrozumiał podstawowego wyniku swoich symulacji.

Merytoryczne uwagi krytyczne mam także do dorobku dr Tretiakova uzyskanego z tematów innych niż własności elastyczne układów modelowych. W pracy z 2009 roku opublikowanej w J.Phys.Chem. A., dr Tretiakov opisał model kooperatywnej adsorpcji nanocząstek na powierzchni. W kluczowym wzorze nr (3), gdzie autor podaje model kinetyczny kooperatywnej adsorpcji występuje błąd w podanej wartości prawdopodobieństwa znalezienia sześciu niezajętych miejsc obok siebie na sieci sześciokątnej. Załóżmy, że mamy sieć sześciokątną, zajętą w części przez zaadsorbowane dyski – jeden dysk może przebywać w jednym węźle. Ułamek zajętych węzłów sieci oznaczmy jako x . W swoim modelu dr Tretiakov potrzebował informacji jakie jest prawdopodobieństwo, p , że wokół danego węzła mamy sześć pustych węzłów. I oblicza to prawdopodobieństwo jako $(1-x)^6$. To wyliczenie stanowi elementarny błąd. Wzór $p=(1-x)^6$ oznacza prawdopodobieństwo znalezienia sześciu pustych miejsc w dowolnych punktach sieci, a nie prawdopodobieństwo znalezienia sześciu wolnych miejsc obok siebie. Można na ten problem spojrzeć inaczej. Prawdopodobieństwa, że przypadkowo rzucone 6 dysków znajdzie dla siebie wolne miejsce na sieci jest dane wzorem użytym w publikacji dr Tretiakova tzn. $(1-x)^6$. Jednak w przypadku kooperatywnej adsorpcji kandydat potrzebował prawdopodobieństwa takiego zdarzenia, że sześć połączonych w sześciokąt dysków rzuconych przypadkowo na płaszczyznę pokrytą

dyskami w ułamku x znajdzie dla siebie wolne miejsce. Takie prawdopodobieństwo powinno bardzo szybko (eksponencjalnie) maleć wraz ze stopniem pokrycia powierzchni x . Wzór (3) opisujący model adsorpcji jest oparty na błędnym wzorze i stąd wnioskuję, że wyniki tej publikacji mogą być obarczone poważnym błędem.

Uważam, że każdy Instytut powinien samodzielnie decydować o habilitacji swoich pracowników. Moim zadaniem, jako recenzenta, jest poinformować Radę Instytutu Fizyki Molekularnej PAN o wszelkich niedociągnięciach, które mogą umknąć uwadze Rady, zwłaszcza gdy patrzy się pobieżnie tylko na stronę formalną habilitacji. Dr Tretiakov spełnia wymogi formalne bez zarzutu. Zabrakło mi w pracach kandydata czegoś więcej niż tylko wyciskania liczb z symulacji komputerowych, co również opisałem w recenzji. Zabrakło mi także listów rekomendacyjnych ze staży podoktorskich. Uważam przy okazji, że staże podoktorskie kandydata wypadły blado z punktu widzenia budowania jego pozycji naukowej w świecie.

Podsumowując: rozprawa habilitacyjna i dorobek dr. Tretiakova, pomimo niedociągnięć merytorycznych, spełniają wymagania stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego zgodnie z ustawą o tytule i stopniach naukowych.

Pozwolę sobie na koniec odejść od tematu mojej oceny i przejść do ogólnych rozważań nad rolą stopnia doktora habilitowanego w Polsce. Stopień doktora habilitowanego sam w sobie, nie daje habilitantowi żadnych nowych możliwości naukowych. Nie wiąże się z pozyskaniem dodatkowych funduszy na badania ani z nowymi etatami w grupie badawczej habilitanta. Jeśli habilitant nie ma grupy badawczej to czy zrobi habilitację czy nie, to i tak jej nie będzie miał. Posiadanie stopnia doktora habilitowanego nie wpływa również na zdobywanie funduszy na naukę. Habilitacja i profesura w Polsce są oderwane od istoty rozwoju naukowego, tj. od posiadania prawdziwej, dużej grupy badawczej i pieniędzy na jej utrzymanie. Ilu jest w Polsce profesorów i doktorów habilitowanych bez swojej grupy badawczej, którzy pracują tak samo lub trochę gorzej jak wtedy, gdy byli adiunktami? W ciągu ostatnich 100 lat zmienił się bardzo paradygmat

naukowca, jak również do pewnego stopnia sposób uprawiania nauki. Kiedyś jeden badacz, sam lub z niedużą grupą mógł spokojnie pracować nad jednym tematem przez całą swoją karierę naukową. Dziś, nad każdym interesującym tematem pracuje wiele grup badawczych. Samotny naukowiec przegra w starciu z licznymi grupami naukowymi. Nie jestem zwolennikiem zniesienia habilitacji. Habilitacja jest trudna tylko dla tych, którzy nie mają pomysłów na pracę naukową i znajdują wygodne wytłumaczenie w postaci utrudnień związanych z tym formalnym szczeblem kariery. Chciałbym jednak zobaczyć inny proces w Polsce: prawdziwe konkursy na stanowiska profesora powiązane z odpowiednią pensją; powiązanie stanowiska profesora z posiadaniem dużej grupy badawczej; konieczność występowania o granty w celu utrzymania grupy badawczej oraz ciągłego staranie się o swój warsztat pracy. W Polsce zawód naukowca nie niesie żadnych konkretnych wymagań poza formalnymi: doktorat, habilitacja, profesura. Wydaje mi się, że czas zastanowić się jak ma wyglądać kariera naukowa w nowej Polsce, bo nauka w odróżnieniu od innych dziedzin gospodarki i życia społecznego nie przeszła jeszcze pełnej i prawdziwej reformy po 1989 roku. Czy gdyby ze stopniem doktora habilitowanego wiązała się 200% podwyżka pensji, duże laboratorium dla grupy, cztery dodatkowe etaty i 1 mln złotych na zagospodarowanie swojego laboratorium, to czy wtedy kryteria oceny dorobku habilitanta byłyby takie same jak dzisiaj? Niestety, przy obecnej strukturze kariery naukowej w Polsce to pytanie jest czysto akademickie. Może reforma nauki coś zmieni.



Prof. dr hab. Robert Hołyst

z-ca dyrektora ds. naukowych

Kierownik Zakładu Fizykochemii Miękkiej Materii

Instytut Chemii Fizycznej PAN

Kasprzaka 44/52, 01-224 Warszawa

holyst@ptys.ichf.edu.pl

<http://soft.ichf.edu.pl/Dep3.html>