



MONTPELLIER, 3. MAJA 2024

LABORA
CHARLI



LABORATOIRE CHARLES
COULOMB

LUCYNA FIRLEJ
Professor of Chemical Physics

+33 (0)4 67 14 47 49
Fax +33 (0)4 67 47

Laboratoire Charles Coulomb
Bat 11, cc.026
Pl. Eugène Bataillon
34095, Montpellier cedex 5

WWW.COULOMB.UNIV-MONTP2.FR
WWW.IUTMONTPELLIER.UNIV-
MONTP2.FR

Recenzja rozprawy habilitacyjnej
**„Wpływ nanoinkluzyj na wybrane własności sprężyste wybranych układów
modelowych twardych cząsteczek”**
oraz dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego
dra inż. Jakuba Wojciecha Narojczyka

=====

Pan dr inż. Jakub W. Narojczyk ukończył studia na Politechnice Poznańskiej na kierunku Fizyka Techniczna, specjalność symulacje komputerowe. W 2004 roku uzyskał tytuł magistra inżyniera na podstawie pracy magisterskiej przygotowanej w Instytucie Fizyki Molekularnej PAN (IFM PAN) pod kierunkiem prof. dra hab. Krzysztofa Wojciechowskiego nt. symulacji komputerowych stałych sprężystości wybranych modeli faz krystalicznych. Tematykę tę rozwijał dalej, przygotowując prace doktorskie pod kierunkiem tego samego promotora w IFM PAN. W 2009 roku uzyskał stopień naukowy doktora nauk fizycznych, przedstawiając rozprawę doktorską „Symulacje komputerowe wpływu dyspersji rozmiarów cząsteczek na współczynnik Poissona w układach modelowych”. Od 2010 roku jest zatrudniony w IFM PAN, na stanowisku adiunkta od 2012 roku.

W latach 2009-2015 pracował dodatkowo jako wykładowca (języki programowania, informatyka w zarządzaniu, "computer science" w języku angielskim), analiza matematyczna, podstawy elektroniki i metrologii) w Państwowej Wyższej Szkole Zawodowej w Kaliszu, głównie na kierunkach: Elektrotechnika, Informatyka, Mechanika i budowa maszyn oraz Zarządzanie bezpieczeństwem.

Kandydat przebywał również na krótkich stażach naukowych we Francji w ramach programów Polonium koordynowanych przez pracowników IFM PAN (w Université du Maine, 2011 i 2012 – po 12 dni, w Université de Rennes, 2016 – 6 dni), na Węgrzech (MTA Center for Energy Research, 2018 i 2019 - po 6 dni) oraz ostatnio na Uniwersytecie w Bristolu (2022 - 3-miesięczny staż w ramach programu Miniatura).

Ocena publikacji stanowiących podstawę rozprawy habilitacyjnej

Na rozprawę habilitacyjną pana dra inż. Jakuba Narojczyka składa się 10 artykułów opublikowanych w latach 2016-2023 (9 po 2019 roku). Prace są tematycznie spójne i dotyczą analizy wpływu struktury mikroskopowej materiałów krystalicznych na ich własności sprężyste, w szczególności identyfikacji czynników powodujących występowanie własności auksetycznych. Metoda badawcza polega na symulacjach numerycznych metodą Monte Carlo w układzie izobaryczno-izotermicznym (NpT). Oprogramowanie niezbędne do wykonania symulacji i wizualizacji otrzymanych wyników zostało stworzone

całkowicie przez Kandydata. Strukturą wyjściową wszystkich materiałów jest modelowy układ ciasno upakowanych twardych kul. Model ten, dzięki swojej prostocie, pozwala na łatwe i koncepcyjnie eleganckie modyfikacje struktury na poziomie mikroskopowym, i systematyczne badania ewolucji symetrii i własności sprężystych (makroskopowych) układu spowodowanych tymi zmianami. Badane przez Kandydata modyfikacje struktur ciasno upakowanych twardych kul polegają na zastąpieniu niektórych kul układu wyjściowego kulami o innej (większej lub mniejszej) średnicy. Zmiany te, nazywane przez Autora inkluzjami, mają zawsze charakter regularny, i stanowią albo cylindryczną inkluzję w strukturze (prace H1, H2, H7), albo wybraną płaszczyznę krystalograficzną (praca H3), albo kombinacje tych zmian (prace H4, H5, H6, H8, H9, H10).

Wszystkie prace pokazują, że wprowadzenie do układu kul o średnicy σ' różnej od tych tworzących strukturę gospodarza (σ) [$\sigma'/\sigma \neq 1$] zmienia symetrię i własności sprężyste układów. Wpływ ten jest modulowany zarówno wielkością stosunku σ'/σ jak i geometrią inkluzji.

Cykl rozpoczynają prace H1 i H2, dotyczące aperiodycznych struktur dimerów twardych kul struktur zawierających inkluzje cylindryczne. Przedstawiona metodologia określenia symetrii zmodyfikowanych układów, ich stałych sprężystości i współczynnika Poissona jest systematycznie użyta we wszystkich pozostałych pracach cyklu. Prace H1 i H2 uważam za oryginalne i szczególnie wymagające technicznie (i czasochłonne): obliczenia prowadzono startując z kilkudziesięciu struktur początkowych, reprezentujących możliwe orientacje dimerów w układzie, a przedstawione wyniki są uśrednieniem tych obliczeń po wszystkich symulowanych systemach. Pokazano, że wprowadzenie wąskiego kanału kul o średnicy σ' wzdłuż osi krystalograficznej [001] struktury fcc gospodarza (praca H1) pozwala kontrolować własności sprężyste układu. W szczególności, modyfikacje współczynnika Poissona, niewielkie dla układów w których $\sigma'/\sigma < 1$, rosną i prowadzą do częściowej auksetyczności układu gdy $\sigma'/\sigma > 1$, w wąskim zakresie tego stosunku. Gdy średnica kanału inkluzji rośnie (praca H2), symetria układu ulega zmianie z kubicznej na tetragonalną. Ponadto, gdy $\sigma'/\sigma > 1.06$ własności auksetyczne układu znacząco rosną i pojawiają się dodatkowe kierunki auksetyczne.

Praca H3 dotyczy periodycznej struktury fcc twardych kul, w której inkluzję stanowi monowartość kul o średnicy $\sigma'/\sigma \neq 1$, prostopadła do kierunku [001]. Również w tym wypadku kandydat wykazał, iż inkluzja powoduje zmianę symetrii układu na tetragonalną. Podobnie, niewielkie zmiany rozmiarów cząstek inkluzji modulują własności elastyczne układu, czyniąc go mniej lub bardziej auksetycznym w wybranych kierunkach, w wąskim zakresie stosunku $\sigma'/\sigma > 1$.

Kolejne prace cyklu można traktować jak próby weryfikacji, czy zmiany własności elastycznych układu poprzez jego strukturalne modyfikacje są addytywne czy też nie. Wbrew oczekiwaniom Autora (autorów) odpowiedź brzmi: nie. Jakakolwiek kombinacja inkluzji (płaszczyzna + kanał, układ wielu kanałów, rozłącznych lub przecinających się) tworzy struktury, w których własności auksetyczne zanikają, gdy $\sigma' > \sigma$ lub gdy $\sigma'/\sigma \neq 1$.

Zaproponowane struktury hybrydowe nie są wyłącznie wytworem wyobraźni

autorów: układy nanoporowate, o skomplikowanej geometrii porów czy metamateriały istnieją naturalnie lub zostały zsyntezowane i opisane w ciągu ostatnich 30 lat. I tak : praca H4 opisuje układ zawierający płaszczyznę i prostopadły do niej kanał inkluzji, praca H5 – system wzajemnie ortogonalnych kanałów zorientowanych wzdłuż kierunków krystalograficznych [100], [010] i [001], przecinających się lub nie. Praca H6 uzupełnia wyniki H5 – układ fcc, w którym jedynie kule o środkach ciężkości leżących w oryginalnej strukturze na kierunkach [100], [010] i [001], zastąpiono kulami o innej średnicy. Praca H7 bada własności sprężyste układu, zawierającego kanały inkluzji równoległe do kierunku [001], w funkcji średnicy kanału. W pracy H8 kanały inkluzji, o trzech różnych średnicach, są zorientowane wzdłuż przekątnych struktury fcc, a w pracy H9 w kierunku [110] i jego symetrycznych odpowiednikach. Praca H10 powraca do idei z prac H1 i H2: tym razem nie kule gospodarza lecz gościa są dimerami (składają się z dwóch sfer), reprezentując inkluzje dwuatomowe. W tym ostatnim przypadku obecność inkluzji nie powoduje zmian współczynnika Poissona zmodyfikowanego układu, ale jego twardość i odporność na ścinanie.

Pomimo iż każda z przedłożonych prac zawiera cenną informację poznawczą, użycie dokładnie tej samej metodologii numerycznej do badań bardzo podobnych układów stanowi moim zdaniem podstawowy problem przedstawionego do oceny cyklu prac. Fakt iż kandydat zajmuje się zjawiskiem akustyczności od ponad dwudziestu lat, stale pod kierownictwem i w ścisłej współpracy z prof. dr hab. K. Wojciechowskim nie pozwala ocenić samodzielności naukowej kandydata, będącej warunkiem sine qua non przyznania stopnia naukowego doktora habilitowanego. Brak mobilności geograficznej podczas 12 lat pracy po doktoracie również nie znajduje uzasadnienia w przedstawionych materiałach. Ostatnio odbyty pierwszy dłuższy (3-miesięczny) pobyt naukowy na uniwersytecie w Bristolu (UK), w ramach pierwszego samodzielnego grantu uzyskanego przez kandydata (Miniatura 5), również nie posłużył poszerzeniu tematyki czy rozszerzeniu warsztatu badawczego.

Struktury auksetyczne zostały praktycznie przygotowane dopiero pod koniec lat osiemdziesiątych ubiegłego wieku; eksperymenty numeryczne dra inż. J. Narojczyka dotyczą więc tematyki stosunkowo nowej, wymagającej opisu i zrozumienia źródeł obserwacji negatywnego współczynnika Poissona na poziomie mikroskopowym. Większość przedstawionych prac została opublikowana niedawno, tak więc liczba ich cytowań jest niewielka (patrz tabela, źródło: Web of Science, i Google Scholar (bez autocytowań)).

	H1	H2	H3	H4	H5	H6	H7	H8	H9	H10
czasopismo	pss-b	pss-b	Mat.	Mat.	Mat.	CMST	pss-b	pss-b	PhysRev E	CMST
rok publikacji	2016	2019	2019	2021	2022	2022	2022	2022	2023	2023
liczba cytowań	18 (20)	36 (30)	18 (23)	9 (9)	11 (12)	--- (0)	7 (8)	3 (3)	1 (1)	-- (2)

pss-b = physica status solidi b, Mat. = Materials, CMST = Computational Methods in Science and Technology

Mimo iż przedstawione prace mają z założenia charakter fundamentalny, uważam że szersze, konkretne odniesienie wyników do istniejących układów auksetycznych znacznie zwiększyłoby oddźwięk prac w środowisku. Kanały i płaszczyzny w układzie

twardych kul można łatwo utożsamić z sieciami porów w układach nanoporowatych, a wprowadzenie do nich inkluzji z procesem adsorpcji. Zasadnicza różnica między tymi układami a badanymi przez Kandydata polega na istnieniu „miękkich” oddziaływań między elementami gospodarza i gościa; niemniej jednak wiele parametrów adsorpcji zależy w zdecydowanym stopniu od relacji geometrycznych w układach. W szczególności, własności auksetyczne zaobserwowano ostatnio w układach typu MOF (metal organic frameworks) o skomplikowanej geometrii porów. Wyniki otrzymane przez dra inż. Narojczyka mogłyby więc stanowić pomoc w interpretacji obserwowanych zachowań.

Ocena dorobku naukowego poza habilitacją.

Dr inż. J. Narojczyk jest w sumie współautorem 35 prac, cytowanych 517 razy (źródło: WoS 06/05/2024). Prace spoza cyklu habilitacyjnego dotyczą własności sprężystych układów przyciągających się twardych kul (model Yukawy), kul miękkich (oddziaływanie wyłącznie odpychające) i układów z nieporządkiem wynikającym z polidispersji rozmiarów kul. Peryferyjnymi tematami było stworzenie oprogramowania do symulacji uporządkowania spinowego, własności magnetycznych i termodynamicznych stopów wieloskładnikowych (współpraca z Uniwersytetem w Maine w ramach programu Polonium). We współpracy z Węgierską Akademią Nauk powstała praca pokazująca, że dla ciśnienia $p = 0$ istnieją procesy, w wyniku których objętość układu zmienia się wyłącznie w wyniku izobarycznego chłodzenia lub ogrzewania. Ciekawym przykładem zastosowania metodologii fizyki statystycznej było opisanie różnic dynamiki (migracji) komórek zdrowych i nowotworowych w organizmach żywych; praca ta, o charakterze interdyscyplinarnym i zrealizowana w zespole międzynarodowym, została opublikowana z współautorstwem Kandydata w Nature Commun. (2018).

Ocena działalności dydaktycznej i organizacyjnej.

Działalność dydaktyczna dra inż. J. Narojczyka wynika głównie z jego zatrudnienia w latach 2009-2015 w Państwowej Wyższej Szkole Zawodowej w Kaliszu. W tym okresie Kandydat wykładał następujące przedmioty: informatyka w zarządzaniu, języki programowania obiektowego, analiza matematyczna, podstawy elektroniki i metrologii, technologia informacyjna i „computer science” (w języku angielskim), na tak różnych kierunkach jak: Elektrotechnika, Informatyka, Mechanika i budowa maszyn, Zarządzanie bezpieczeństwem czy Ratownictwo medyczne. Ponadto w latach 2010-2011 prowadził wykłady nt. symulacji komputerowych układów modelowych w ramach międzynarodowych warsztatów dla studentów i doktorantów „Computational Nanotechnology” na Politechnice Gdańskiej. W 2018 roku wygłosił wykład o materiałach auksetycznych na międzynarodowej szkole VIPER -4 na uniwersytecie w Bristolu. Dr inż. Narojczyk brał także udział w wydarzeniach popularyzujących naukę, organizowanych przez IFM PAN (2020 – Fizyka Warta Poznania, 2020 i 2022 – Noc naukowców, 2017 – Lato z Helem) oraz przez Politechnikę Poznańską (2017 – Software Freedom Day).

Dr inż. J. Narojczyk uczestniczy systematycznie, jako członek komitetu organizacyjnego i sekretarz konferencji w krajowych (1) i międzynarodowych (7) spotkaniach naukowych. Był współredaktorem czterech książek abstraktów (2014, 2016, 2017, 2019) wydanych na konferencji ‘Auxetic and other materials and models with negative characteristics’.

Uwagi końcowe.

Na podstawie analizy złożonej dokumentacji stwierdzam, że dr Jakub W. Narojczyk spełnia wymogi formalne stawiane w art 219 ustawy z dnia 20.07.2018 'Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce'. Przedstawiony cykl powiązanych tematycznie artykułów opublikowanych w czasopismach naukowych stanowi znaczący wkład w rozwój dyscypliny nauki fizyczne.

Samodzielną mobilność tematyczną i geograficzną kandydata uważam jednak za niewystarczającą.

W związku z powyższym, mimo iż wyrażam pozytywną opinię o przedstawionych osiągnięciach, wyrażam rezerwę w sprawie wszczęcia dalszych czynności w postępowaniu o nadanie dr. inż. Jakubowi W. Narojczykowi stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki fizyczne.

Profesor Lucyna FIRLEJ