

dr hab. Dariusz Chrobak, prof. UŚ
Instytut Inżynierii Materiałowej
Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych
Uniwersytet Śląski w Katowicach
ul. 75 Pułku Piechoty 1A
41-500 Chorzów
email: dariusz.chrobak@us.edu.pl

Chorzów, dn. 18.09.2023 r.

Recenzja dorobku naukowego

dr Marceli Trybuły

w związku z postępowaniem o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych, w dyscyplinie inżynieria materiałowa

Podstawą wykonania recenzji jest powołanie mnie w roli recenzenta, uchwałą Rady Naukowej Instytutu Metalurgii i Inżynierii Materiałowej im. A. Krupkowskiego Polskiej Akademii Nauk z dnia 26 lipca 2023, do komisji habilitacyjnej w postępowaniu o nadanie dr Marceli Trybuły stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych, w dyscyplinie inżynieria materiałowa. Postępowanie zostało wszczęte na wniosek Habilitantki z dnia 10 maja 2023 roku.

Do wniosku dołączono:

- *dane Habilitantki,*
- *kopię dokumentu stwierdzającego nadanie stopnia naukowego doktora,*
- *autoreferat zawierający:*
 - *dyskusję osiągnięcia naukowego,*
 - *informację o wykazaniu się istotną aktywnością naukową,*
 - *informację o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę,*
- *wykaz osiągnięć naukowych stanowiących znaczny wkład w rozwój inżynierii materiałowej,*
- *kopie publikacji naukowych stanowiące podstawę do ubiegania się o stopień naukowy doktora habilitowanego,*
- *oświadczenia współautorów o ich udziale w przygotowanie poszczególnych publikacji będących podstawą do postępowania habilitacyjnego,*
- *potwierdzenia odbycia stażu podoktorskiego i wizyt studyjnych,*
- *potwierdzenia kierowania projektami badawczymi.*

Struktura dokumentu:

1. Informacje ogólne.
2. Ocena głównego osiągnięcia naukowego.
3. Ocena pozostałego dorobku naukowego i aktywności badawczej.
4. Ocena osiągnięć dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę.
5. Wniosek końcowy.

1. Informacje ogólne

Dr Marcela Trybuła, na podstawie rozprawy pod tytułem: „*Thermodynamic, structural and thermophysical properties of liquid Al-Li-Zn alloys*”, uzyskała stopień naukowy doktora nauk technicznych w zakresie inżynierii materiałowej, który nadano uchwałą Rady Naukowej Instytutu Metalurgii i Inżynierii Materiałowej im. A. Krupkowskiego Polskiej Akademii Nauk (PAN) z dnia 18 czerwca 2015 roku.

Wcześniej, w 2010 roku, dr Marcela Trybuła ukończyła studia na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego (specjalizacja: chemia teoretyczna), broniąc pracę magisterską pod tytułem: „*Teoretyczny opis wiązania chemicznego w łańcuchach węglowych*”.

Habilitantka prowadzi działalność naukową, dydaktyczną i popularyzatorską będąc zatrudnioną w Instytucie Metalurgii i Inżynierii Materiałowej im. A. Krupkowskiego PAN w Krakowie. Najpierw, od 1 stycznia do 30 października 2017 roku, na stanowisku specjalisty, a następnie od 31 października 2017 na stanowisku adiunkta. W okresie od marca 2020 do stycznia 2022 dr Marcela Trybuła była również asystentką w Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych Uniwersytetu Warszawskiego.

2. Ocena głównego osiągnięcia naukowego

2.1. Uwagi ogólne

Jako osiągnięcie naukowe, o którym mowa w art. 219 ust. 1 pkt. 2 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce (Dz. U. z 2021 r. poz. 478), dr Marcela Trybuła przedstawiła, opublikowany w latach 2016-2023, cykl siedmiu publikacji naukowych pod wspólnym tytułem: „*Struktura materiałów krystalicznych, amorficznych i ciekłych na poziomie atomowym w ujęciu metod dynamiki molekularnej i analizy topologicznej*”:

[A1] Marcela E. Trybula „Structure and transport properties of the liquid $Al_{80}Cu_{20}$ alloy - A molecular dynamics study”, Computational Materials Science 122 (2016) 341-352.

[A2] Marcela E. Trybula, Przemysław W. Szafranski and Pavel A. Korzhavyi „Structure and chemistry of liquid Al–Cu alloys: molecular dynamics study versus thermodynamics-based modelling”, Journal of Materials Science 11 (2018) 8285-8301.

[A3] Aleksandra Drewieniekwicz, Arkadiusz Żydek, Marcela E. Trybula and Janusz Pstruś „Atomic Level Insight into Wetting and Structure of Ag Droplet on Graphene Coated Copper Substrate - Molecular Dynamics versus Experiment”, Nanomaterials 11(6) (2021) 1465.

[A4] Arkadiusz Żydek, Mariusz Werminiński and Marcela E. Trybula „Description of grain boundary structure and topology in nanocrystalline aluminum using Voronoi analysis and order parameter”, Computational Materials Science 197 (2021) 110660.

[A5] Marcela E. Trybula and Pavel A. Korzhavyi „Atomistic Simulations of Al(100) and Al(111) Surface Oxidation: Chemical and Topological Aspects of the Oxide Structure”, Journal of Physical Chemistry C 123(1) (2019) 334-346.

[A6] Marcela E. Trybula and Pavel A. Korzhavyi „Temperature dependency of structure and order evolution in 2D confined oxide films grown on Al substrates using reactive molecular dynamics”, Vacuum 190 (2021) 110243.

[A7] Marcela E. Trybula, Arkadiusz Żydek, Pavel Korzhavyi, Joanna Wojewoda-Budka „Structure and behaviour of oxide-coated aluminum surface in contact with strongly alkaline and acidic aqueous solutions - a reactive molecular dynamics simulation study” Journal of Physical Chemistry C, 127(5) (2023) 2493-2507.

Należy podkreślić, że wymienione wyżej prace dr Marceli Trybuli zostały opublikowane w renomowanych czasopismach naukowych o zasięgu międzynarodowym: Computational Materials Science, Journal of Materials Science, Nanomaterials, Journal of Physical Chemistry i Vacuum.

Udokumentowana przez Habilitantkę rola w powstanie poszczególnych artykułów naukowych jest niewątpliwie znacząca:

- między innymi: była pomysłodawczynią badań, planowała i realizowała symulacje komputerowe, przeprowadziła analizę wyników eksperymentów komputerowych, brała udział w tworzeniu manuskryptów, a także uczestniczyła w procesie ich recenzji;
- zajmuje pierwszą pozycję na liście autorów w pracach A1, A2, A5, A6 oraz A7;
- była autorem korespondencyjnym w pracach A1 – A7.

Sumaryczny Impact Factor publikacji stanowiących główne osiągnięcie naukowe tego postępowania habilitacyjnego wynosi 26.008, a liczba cytowań wykazanych w autoreferacie osiągnęła liczbę 72. Daje to 10.3 cytowań na publikację. Przedstawiony do oceny cykl siedmiu obszernych prac naukowych liczy 89 stron. Integralną częścią tych artykułów są suplementy o objętości 60 stron.

W obszarze badań naukowych zaprezentowanych przez Habilitantkę w pracach A1 – A7, można wskazać dwie zasadnicze części. Pierwsza dotyczy badania struktury i jej wpływu na właściwości ciekłych stopów na bazie aluminium (Al-Cu), druga to zagadnienia dotyczące mechanizmu utleniania powierzchni krystalicznego aluminium. Ponadto zaprezentowano: badania struktury granicy ziaren w nanokrystalicznym aluminium oraz modelowanie uporządkowania atomowego ciekłej kropli Ag na podłożu Cu wzbogaconym warstwą grafenu. Czynnikiem łączącym zagadnienia poruszane przez Habilitantkę jest zastosowana metodyka oparta na eksperymencie komputerowym. Do symulacji na poziomie atomowym procesów fizycznych Habilitantka stosowała metodę tak klasycznej jak i kwantowej dynamiki molekularnej. W szczególności recenzenta zainteresowało twórcze wykorzystanie metody Woronoja do analizy uporządkowania atomowego w badanych układach fizycznych.

Zdaniem recenzenta, integralną częścią współczesnych nauk ścisłych jest eksperyment komputerowy eksplorujący trudne do osiągnięcia na drodze klasycznego doświadczenia obszary świata materialnego. Droga ta prowadzi nie tylko do głębszego (na poziomie atomowym) zrozumienia zjawisk i procesów fizyko-chemicznych zachodzących w różnych materiałach, ale również poprzez swoiste sprzężenie zwrotne inspiruje działalność ukierunkowaną na ich wytwarzanie i w dalszej kolejności praktyczne zastosowanie. W tym świetle uważam, że główne osiągnięcie naukowe stanowiące podstawę postępowania habilitacyjnego dr Marceli Trybuły stanowi ten rodzaj aktywności, która znakomicie mieści się w zakresie nauk inżynierijno-technicznych, a w szczególności w dyscyplinie inżynieria materiałowa.

2.2. Analiza głównego osiągnięcia naukowego

Analiza struktury stopów metali w fazie ciekłej nie jest prostym zadaniem. W szczególności przeprowadzenie symulacji komputerowych wymaga starannego doboru potencjałów modelujących oddziaływania międzycząsteczkowe oraz metod badania subtelnego uporządkowania bliskiego zasięgu.

Przykładem pomyślnego rozwiązania tych problemów jest materiał zawarty w pracach **A1** oraz **A2**, gdzie badano strukturę i jej wpływ na właściwości ciekłego stopu $\text{Al}_{80}\text{Cu}_{20}$. W publikacji **A1** zaproponowano nową parametryzację potencjału typu MEAM zapewniającą zgodność wyników otrzymanych przy jego użyciu z danymi doświadczalnymi i teoretycznymi *ab initio*. Na tej podstawie Habilitantka wykazała, że dominującym typem uporządkowania bliskiego zasięgu jest uporządkowanie ikozaedryczne. Co więcej, możliwe było rozpoznanie jego wpływu na zjawiska dyfuzji i lepkości w stopie $\text{Al}_{80}\text{Cu}_{20}$.

Artykuł **A2** jest kontynuacją tematyki podjętej w pracy **A1**. Nową parametryzację potencjału MEAM wykorzystano w badaniach struktury i wybranych własności stopu $\text{Al}_{1-x}\text{Cu}_x$ ($x=10, 30, 40$ oraz 50 at.%). Badania strukturalne metodą Woronoja były wstępem do, przeprowadzonej w dalszej części artykułu, analizy termodynamicznej fazy ciekłej stopu Al-Cu. Habilitantka udowodniła tezę, że obecność, a w gruncie rzeczy gęste upakowanie atomów w grupach typu ikozaedru stabilizuje fazę ciekłą stopu oraz modyfikuje jego właściwości transportowe i termodynamiczne. Ponadto, umiejętne zastosowanie metody Woronoja wykazało, że jest ona skuteczną metodą analizy uporządkowania bliskiego zasięgu i może być z powodzeniem zastosowana do ciekłych stopów układu Al-Cu.

Wyniki kolejnej publikacji **A3** dotyczą modelowania zjawiska zwilżania kroplą ciekłego srebra powierzchni miedzi, miedzi pokrytej warstwą grafenu oraz miedzi pokrytej zdefektowaną warstwą grafenu. Tutaj wyniki symulacji komputerowych zostały w pewnym stopniu porównane z wynikami realnego eksperymentu zwilżania kroplą Ag miedzi pokrytej grafenem. Habilitantka zastosowała metodę Woronoja do analizy struktury kropli Ag i warstewki stopu AgCu utworzonego na skutek kontaktu ciekłego srebra i miedzi. W pracy zbadano wpływ zdefektowania grafenu na zjawisko zwilżania ciekłym Ag.

W pracy **A4** autorzy zastosowali metodę dynamiki molekularnej i metodę Woronoja do badań struktury atomowej granic ziaren w nanokrystalicznym aluminium. Zaproponowano kategoryzację wskaźników Woronoja bazującą na analizie struktury granicy ziaren bikrystalicznego Al o różnych kątach dezorientacji. Następnie analizę rozszerzono na przypadek polikryształu. Jak się wydaje istotnym wynikiem pracy **A4** było zrozumienie wpływu małych odkształceń sieci krystalicznej oraz niewielkich zmian położenia atomów na wzrost entropii konfiguracyjnej układu. Zauważono, że obecność uporządkowania atomowego charakteryzującego się wysokim wskaźnikiem Woronoja, np. (0.6.0.8.0), powoduje wzrost entropii konfiguracyjnej bikryształu Al. Wykazano również przydatność analizy opartej na metodzie Woronoja do oszacowania grubości rdzenia granicy ziarna.

Trzy ostatnie prace cyklu dotyczą zjawiska tworzenia warstwy tlenkowej podczas utleniania aluminium (A5, A6) oraz wpływu roztworu o odczynie silnie kwaśnym i silnie zasadowym na utlenione podłoże Al (A7). Prace A5 i A6 powstały podczas stażu podoktorskiego odbytego w szwedzkim KTH Royal Institute of Technology. W badaniach, do opisu oddziaływania międzyatomowego, wykorzystano metodę tzw. reaktywnego pola siłowego (ReaxFF).

Jak wykazano (A5), utlenianie powierzchni Al(111) oraz Al(100) gazowym tlenem w temperaturze 300 K prowadzi do powstania ultracienkich warstewek tlenku aluminium, których strukturę charakteryzuje obecność pierścieni typu $2n$, $3n$, $4n$ i $5n$ (n to liczba powtórzeń par Al-O). Habilitantka wraz z pozostałymi autorami pracy wykazali dominującą rolę pierścieni typu $3n$, natomiast pierścieniom typu $4n$ i $5n$ przypisali rolę inicjatorów tworzenia nanostruktur, a właściwie defektów takich jak: pory i pustki. W badanych warstwach tlenkowych zaobserwowano obecność struktur typu AlO_5 . Ich znaczna obecność w warstwie tlenkowej na powierzchni Al(100) sprawia, że stopień uporządkowania tej warstwy jest mniejszy niż w przypadku warstwy na podłożu Al(111).

Publikacja A6 przynosi kolejne symulacje komputerowe poszerzające wiedzę o strukturze warstw tlenkowych na powierzchni aluminium. Tym razem na wiele uwagi poświęcono analizie zmian struktury (uporządkowania atomowego) tych warstw w funkcji temperatury. W szczególności dokładnej obserwacji poddano zawartość tak zwanych mostków tlenowych (O-O). Wzrost temperatury utleniania powoduje zmniejszenie liczby obserwowanych mostków tlenowych. W niskiej temperaturze (150 K) przestrzenna dystrybucja mostków O-O sprzyja powstawaniu szerokich i płytkich nieckowych obszarów w warstwie tlenkowej, natomiast utlenianie w temperaturze 673 K tworzy węższe i jednocześnie głębsze pory. Zmieniająca się wraz z temperaturą utleniania liczba mostków O-O nie pozostaje bez wpływu na rodzaj uporządkowania atomowego warstwy tlenkowej.

Ostatnia z publikacji (A7) stanowi rozwinięcie metody Woronoja do analizy struktury ultracienkich warstw tlenkowych generowanych na aluminium. W pracy tej zaproponowano szczególną kategoryzację indeksów Woronoja reprezentującą: idealną strukturę fcc, sieć odkształconą, sieć zdefektowaną oraz fazę ciekłą i/lub amorficzną.

Praca A7 niejako wieńczy dotychczasowy rozwój aplikacyjny metody Woronoja dla badań uporządkowania atomowego układach, przede wszystkim, niekryształicznych i stanowi, w opinii recenzenta, istotne osiągnięcie Habilitantki o charakterze metodologicznym.

Po lekturze treści publikacji A1-A7, chciałbym raz jeszcze podkreślić, że zaprezentowany w nich rozwój metodologii charakteryzacji uporządkowania bliskiego zasięgu w układach niekryształicznych jak również efekty jej zastosowania w badaniach:

- struktury atomowej stopów Al-Cu,
- struktury atomowej granicy ziaren w nanokrystalicznym aluminium,
- struktury atomowej warstw tlenkowych na podłożu aluminiowym,

wpisują się w zakres inżynierii materiałowej i są istotne z punktu widzenia jej rozwoju.

Osiągnięcia naukowe przedstawione w ramach tego postępowania habilitacyjnego przekonują o zdolnościach Habilitantki do samodzielnego rozwiązywania złożonych problemów naukowych.

3. Ocena pozostałego dorobku naukowego i aktywności badawczej.

Analiza całokształtu działalności naukowej dr Marceli Trybuły pozwala określić szereg obszarów zainteresowań badawczych mieszczących się w zakresie nauk inżynieryjno-technicznych i w dziedzinie inżynierii materiałowej. Należą do nich:

- przed doktoratem:
 - struktura i właściwości ciekłych stopów Al-Zn z dodatkiem litu badane z wykorzystaniem teoretycznych modeli termodynamicznych oraz eksperymentalnie,
- po uzyskaniu doktoratu:
 - struktura i właściwości termodynamiczne ciekłych stopów Li-Sb,
 - analiza DFT przesunięć chemicznych związków organicznych,
 - modelowanie korozji metalowych obiektów muzealnych na osnowie Cu,
 - zagadnienia naukowe przedstawione w publikacjach A1-A7 (punkt 2.2).

Udział Habilitantki w realizacji wymienionych wyżej aktywności naukowych miał charakter głównie teoretyczny: symulacje komputerowe metodami mechaniki klasycznej i kwantowej. Osiągnięcia dr Marceli Trybuły w tym zakresie i jej wiedzę o metodach modelowania komputerowego materiałów uważam za znaczące. Świadczy o tym fakt, że jako specjalistka w tym obszarze naukowym była zapraszana do udziału w wielu projektach badawczych. Swoje zainteresowania naukowe realizowała: podczas stażu podoktorskiego w szwedzkim Królewskim Instytucie Technologicznym (KTH Royal Institute of Technology), w ramach współpracy z grupą badawczą z Uniwersytetu w Lund (Szwecja), a także z Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznym

Uniwersytetu Warszawskiego. Ponadto, zrealizowała krótkie, kilkudniowe wizyty naukowe w Paul Sherer Institute (Szwajcaria) oraz w Aalto University (Finlandia).

Na dorobek naukowy Habilitantki składa się z 15 artykułów opublikowanych w czasopiśmie z listy Journal Citation Reports (JCR) oraz kolejne 5 opublikowanych (po doktoracie) w materiałach pokonferencyjnych. Łączna liczba cytowań wynosi 143 (bez autocytowań 127), a liczba cytowań po doktoracie 137 (bez autocytowań 113). Brała udział w 11 projektach naukowo-badawczych (krajowych i zagranicznych), w tym w pięciu jako kierownik. Wygłosiła w sumie 26 referatów konferencyjnych, w tym 3 na zaproszenie organizatorów. Po uzyskaniu doktoratu wykonała 31 recenzji artykułów dla m.in.: Journal of Physical Chemistry Letters, Journal of Physical Chemistry, Archives of Metallurgy and Materials Science, Nano Research, Applied Surface Science, Computational Materials Science, Journal of Materials Science.

Wskaźnik Hirsha (wg. Web of Science) Habilitantki wynosi 8. Całkowity Impact Factor jej publikacji wynosi 51,577 (w tym 43,577 po doktoracie), a całkowita liczba punktów MEiN to 980 (w tym 850 po doktoracie).

Dr Marcela Trybuła brała udział we wspólnych przedsięwzięciach naukowych w ramach współpracy z ośrodkami zagranicznymi (KTH Szwecja, LANL USA, Federal Institute for Materials Research and Testing BAM Niemcy) oraz krajowymi (Wydział Farmaceutyczny Collegium Medicum Uniwersytetu Jagiellońskiego, Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki AGH, Instytut Metali Nieżelaznych Sieć Łukasiewicz w Skawinie).

W świetle powyższych informacji stwierdzam, że całokształt dorobku naukowego dr Marceli Trybuły należy uznać za wystarczający do ubiegania się o stopień naukowy doktora habilitowanego w dziedzinie nauk inżynierijno-technicznych w dyscyplinie inżynieria materiałowa.

4. Ocena osiągnięć dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę.

Dr Marcela Trybuła, w latach 2016-2020, była promotorem pomocniczym w 1 pracy doktorskiej, a obecnie pełni tę funkcję w ramach 2 prac doktorskich. Była promotorem 1 pracy magisterskiej. Ponadto, Habilitantka prowadziła praktyki dla studentów Uniwersytetu Jagiellońskiego i Akademii Górniczo-Hutniczej. W 2017, podczas pobytu w KTH Royal Institute of Technology, była opiekunką stażu naukowego w ramach programu ERASMUS.

Działalność organizacyjna Habilitantki jest związana przede wszystkim z współorganizacją sympozjów naukowych poświęconych zagadnieniom związanym z wykorzystaniem metod obliczeniowych w inżynierii materiałowej. Po uzyskaniu stopnia doktora była również członkiem komitetu organizacyjnego konferencji TOFA 2022. Habilitantka była także zaangażowana w

organizację ogólnopolskiego Dnia Inżynierii Materiałowej w Instytucie Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN w 2023 roku.

Ten krótki przegląd świadczy, zdaniem recenzenta, o wielostronnym zaangażowaniu Habilitantki w życie naukowe macierzystego instytutu.

5. Wniosek końcowy.

Pozytywnie oceniam dorobek naukowy dr Marceli Trybuły przedstawiony mi do recenzji w ramach jej postępowania habilitacyjnego. Dr Marcela Trybuła w ciągu kilku zaledwie lat od obrony pracy doktorskiej znacząco zwiększyła swój dorobek naukowy – z 4 publikacji przed do 16 publikacji po doktoracie. Tym samym Habilitantka zadbała o właściwe upowszechnienie rezultatów swojej działalności naukowej, a w szczególności położyła znaczący nacisk na współpracę z tak zagranicznymi jak również krajowymi ośrodkami naukowymi.

W mojej opinii dr Marcela Trybuła wykazała zdolności do samodzielnego stawiania i rozwiązywania skomplikowanych problemów naukowych. Jej dorobek badawczy, wraz z przedstawionym do recenzji osiągnięciem ujętym w cykl 7 publikacji naukowych, świadczy o istotnym wkładzie w rozwój inżynierii materiałowej w zakresie zaawansowanych metod obliczeniowych, a w szczególności w obszarze zastosowania symulacji komputerowych i metody Woronoja w badaniach struktury oraz jej wpływu na własności i zjawiska zachodzące przede wszystkim w fazach niekryształicznych.

W konkluzji niniejszej recenzji stwierdzam, że dr Marcela Trybuła spełnia kryteria pozytywnej oceny dorobku naukowego osoby wnioskującej o nadanie stopnia doktora habilitowanego.

W związku z tym zwracam się do Rady Naukowej Instytutu Metalurgii i Inżynierii Materiałowej im. A. Krupkowskiego Polskiej Akademii Naukowej w Krakowie o przyznanie dr Marceli Trybule stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych, w dyscyplinie inżynieria materiałowa.

Dariusz Chwałek