

Kraków, 19 września 2023 r.

Prof. dr hab. inż. Robert Filipek
Akademia Górniczo - Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie
Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki
al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków

OCENA

osiągnięć naukowych dr Marceli Trybuły ubiegającej się o stopień doktora habilitowanego w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych w dyscyplinie inżynieria materiałowa

Niniejsza ocena została przygotowana na zlecenie Rady Naukowej Instytutu Metalurgii i Inżynierii Materiałowej im. A. Krupkowskiego PAN w Krakowie, pismo DP.521.2.2023 z dnia 26 lipca 2023 r. Recenzja została wykonana m.in. na podstawie analizy głównego osiągnięcia naukowego dr Marceli Trybuły, tj. cyklu prac powiązanych tematycznie pt. „*Struktura materiałów krystalicznych, amorficznych i ciekłych na poziomie atomowym w ujęciu metod dynamiki molekularnej i analizy topologicznej*”, autoreferatu, wykazu innych osiągnięć naukowych oraz innych dokumentów dostarczonych we wniosku.

Informacje ogólne

Dr Marcela Trybuła jest absolwentką Uniwersytetu Jagiellońskiego, gdzie w 2010 roku ukończyła studia magisterskie na Wydziale Chemii, kierunek Chemia Teoretyczna. W roku 2015 przedstawiła rozprawę doktorską pt. „*Thermodynamic, structural and physicochemical properties of liquid Al-Li-Zn alloys*”, której promotorami byli prof. dr hab. inż. Władysław Gąsior, Instytut Metalurgii i Inżynierii Materiałowej, PAN oraz prof. Alain Pasturel, Grenoble University of Technology, Grenoble-INP, Francja. W dniu 18 czerwca 2015 roku, na mocy uchwały Rady Naukowej Instytutu Metalurgii i Inżynierii Materiałowej im. Aleksandra Krupkowskiego Polskiej Akademii Nauk, dr Trybuła uzyskała stopień doktora nauk technicznych w dyscyplinie inżynieria materiałowa.

Swoją karierę naukową Pani dr Trybuła związała z Instytutem Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN w Krakowie, gdzie była zatrudniona najpierw na stanowisku specjalisty (od stycznia 2017), a następnie na stanowisku adiunkta (od października 2017 do chwili obecnej). Doktor Trybuła w okresie od marca 2020 do stycznia 2022 była zatrudniona w Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych na Uniwersytecie Warszawskim na stanowisku adiunkta.

Ocena cyklu prac powiązanych tematycznie przedłożonych jako główne osiągnięcie habilitacyjne

Zgodnie z art. 219 ust. 1 Ustawy Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce z dnia 20 lipca 2018 r. dr Marcela Trybuła, jako główne osiągnięcie przedstawiła cykl siedmiu prac powiązanych tematycznie, zatytułowany „*Struktura materiałów krystalicznych, amorficznych i ciekłych na poziomie atomowym w ujęciu metod dynamiki molekularnej i analizy topologicznej*”. Przedłożony cykl publikacji mieści się w obszarze nauki o materiałach, stanowi podsumowanie aktywności naukowej Habilitantki w zakresie badań struktury materiałów krystalicznych, amorficznych i ciekłych w oparciu o modelowanie matematyczne metodą dynamiki molekularnej oraz analizy topologicznej.

Główne osiągnięcie naukowe obejmuje łącznie 89 stron wraz z dodatkowym opisem zamieszczonym w suplementach (łącznie 60 stron). Wszystkie prace będące głównym osiągnięciem naukowym Habilitantki zostały opublikowane w przeciągu 8 lat (2016-2023) w czasopiśmie naukowych umieszczonych w wykazie *Journal Citation Reports*. Sumaryczny Impact Factor cyklu prac, liczony według roku publikacji wynosi 26,008, natomiast łączna liczba punktów w punktacji MEiN wynosi 580. W jednej z prac Habilitantka jest jedynym autorem. Na podstawie oświadczeń współautorów, można stwierdzić, iż Habilitantka posiada dominujący koncepcyjny wkład w powstanie pozostałych sześciu prac będących głównym osiągnięciem dr Trybuły. W pięciu pracach Habilitantka jest pierwszym autorem, zaś we wszystkich autorem korespondencyjnym.

Głównym celem prowadzonych przez Habilitantkę badań był opis struktury i właściwości materiałów krystalicznych, amorficznych i ciekłych. Habilitantka wykorzystwała symulacje komputerowe metodą dynamiki molekularnej do poznania uporządkowania atomowego w materiale i jego zachowania podczas zmiany składu chemicznego i czynników zewnętrznych, takich jak temperatura, ciśnienie. Cel ten zrealizowała poprzez następujące cele szczegółowe:

- a) opis struktury i jej wpływ na właściwości ciekłych metali i stopów wykorzystując metodę analizy Woronoja;
- b) rozszerzenie metody Woronoja na badania struktury materiałów polikrystalicznych;
- c) opis uporządkowania, struktury i kinetyki wzrostu cienkich warstw tlenkowych na podłożu krystalicznym i amorficznym w kontakcie z gazowym tlenem i z roztworem wodnym w ujęciu reaktywnej metody dynamiki molekularnej i analizy topologicznej.

Jako obiekt badawczy, Habilitantka wybrała aluminium i jego stopy, które znajdują szerokie zastosowanie, od zastosowań codziennego użytku, do zaawansowanych, w przemyśle lotniczym, samochodowym, itd.

Pierwszy cel szczegółowy, tj. opis struktury i jej wpływ na właściwości ciekłych metali i stopów, Habilitantka zrealizowała w cyklu trzech prac (A1-A3). Główną motywacją do podjęcia badań były doniesienia literaturowe, dotyczące anomalnego zachowania struktury w ciekłym stopie Al₈₀Cu₂₀. Dostępne parametryzacje pól siłowych dla metod dynamiki molekularnej do opisu oddziaływania w badanym stopie Al₈₀Cu₂₀, uniemożliwiały potwierdzenie anomalnego zachowania struktury czy parametru chemicznego i topologicznego uporządkowania atomowego, jak i jego wpływu na właściwości transportowe. Habilitantka

zapropozowała więc modyfikację parametrów do zmodyfikowanego modelu atomu zagnieżdżonego stosowanego w dynamice molekularnej (MEAM-MD), co w połączeniu z analizą Woronoja, pozwoliło Jej na wyjaśnienie anomalii w zachowaniu struktury w ciekłym stopie $\text{Al}_{80}\text{Cu}_{20}$. Analiza topologiczna wykazała, że uporządkowanie ikozaedryczne bliskiego zasięgu (ISRO), dominuje w ciekłym stopie $\text{Al}_{80}\text{Cu}_{20}$. Uporządkowanie ISRO prowadzi w efekcie do tworzenia gęsto upakowanej struktury badanego stopu w temperaturze 885K, wpływającej na anomalne zachowanie struktury. Habilitantka wyznaczyła również zależność temperaturową w ciekłym stopie $\text{Al}_{80}\text{Cu}_{20}$ dla wskaźników Woronoja, w celu dokładniejszego opisu zachowania ISRO, która pozwoliła zaobserwować spadek liczby ich zawartości ze wzrostem temperatury a tym samym spadkiem gęstości upakowania struktury. Badania poszerzyła o analizę wpływu uporządkowania ikozaedrycznego bliskiego zasięgu na właściwości ciekłego stopu $\text{Al}_{80}\text{Cu}_{20}$, wliczając w to lepkość i współczynnik dyfuzji. Zaobserwowała wpływ uporządkowania ikozaedrycznego na nieliniową zmianę lepkości w funkcji temperatury. Wykazała, że istnienie ISRO powoduje spowolnienie dynamiki atomów przejawiające się mniejszymi współczynnikami dyfuzji i przyczynia się do płynięcia „lepkiego” w pobliżu temperatury topnienia stopu.

Aby zbadać wpływ uporządkowania ISRO na strukturę oraz właściwości transportowe i termodynamiczne ciekłych stopów z układu Al-Cu, Habilitantka w pracy A2 rozszerzyła zakres analizowanych stopów do zawartości 50%at. Cu. Wykorzystała metodę MEAM-MD i zaproponowała model termodynamiczny opisu ciekłych stopów mających tendencję do tworzenia klastrów atomów. Istotnym, otrzymanym wynikiem było potwierdzenie istnienia uporządkowania ISRO, w którym klastry atomów o symetrii pięciokąta dominują, wpływając jednocześnie na powstanie gęsto upakowanej struktury ciekłych stopów. Różnice składu chemicznego zbadanych ciekłych stopów z układu Al-Cu wpływają na dużą liczbę i rodzaj wskaźników Woronoja. Zauważyła, że dominują wskaźniki Woronoja typu (0.1.10.2.0), (0.3.6.4.0) i to one są odpowiedzialne za spowolnioną dynamikę strukturalną w porównaniu do luźno upakowanych klastrów atomów w cieczy, sprzyjających przemieszczeniu się grup atomów na znaczne odległości. Kolejnym istotnym wynikiem badań Habilitantki była obserwacja zróżnicowania w rozkładzie wskaźników Woronoja wyznaczona dla atomów Al i atomów Cu w badanych ciekłych stopach. Wykazała, że zaobserwowane zróżnicowanie w uporządkowaniu ISRO dla poszczególnych atomów w ciekłych stopach z układu Al-Cu, mogą wpływać na procesy zachodzące podczas chłodzenia cieczy do tworzenia stopów o strukturze polikrystalicznej zamiast struktury amorficznej.

W pracy A2 Habilitantka pokazała także, że uporządkowanie ISRO przyczynia się do spadku nadmiarowej entropii konfiguracji wraz ze wzrostem zawartości miedzi w stopach Al-Cu. Co więcej, ISRO przyczynia się również do znacznego różnicowania w cząstkowej nadmiarowej entropii konfiguracji dla atomów Al i Cu. Taki wpływ ISRO zauważyła dla stopów bogatych w Al, który zanika wraz ze wzrostem zawartości Cu w ciekłych stopach Al-Cu i jest konsekwencją dużej zawartości wskaźników Woronoja reprezentujących idealny ikosaedr (0.0.12.0). Ty samym pokazała, że zachowanie całkowitej i cząstkowych nadmiarowych funkcji entropii konfiguracyjnej z równania zdefiniowanego przez Dzugutov'a jest odzwierciedleniem wpływu uporządkowania ISRO na zachowanie ciekłych stopów. Habilitantka potwierdziła wpływ uporządkowania ISRO i zmian cząstkowej entropii konfiguracji na spadek współczynników dyfuzji dla atomów Al i Cu. Nieliniowa zmiana współczynnika dyfuzji koreluje z nieliniową zmianą lepkości ze wzrostem zawartości Cu w ciekłych stopach Al-Cu.

Podsumowując w pracach A1 i A2 Habilitantka pokazała, że lokalne uporządkowanie struktury wynikające z istnienia bloków atomów typu ikosaedru ma pozytywny wpływ na stabilizację fazy ciekłej, co wynika z ich gęsto upakowanej struktury i wpływa na zachowanie właściwości transportowych i termodynamicznych. Pokazała również, że analiza Woronoja jest skuteczną metodą do przewidywania struktury ciekłych stopów z układu Al-Cu.

W pracy A3 Habilitantka zastosowała metodę Woronoja do bardziej złożonych układów, tj. do badania uporządkowania atomowego i struktury ciekłej kropli Ag zwilżającej stałe podłoże Cu z naniesioną uprzednio warstwą grafenu. Uzyskane wyniki pozwoliły wyznaczyć parametry zwilżania, tj. kąt zwilżania i powierzchnię rozpląwu oraz ich zmianę w funkcji czasu. Należy zaznaczyć, że zastosowane podejście metodologiczne do opisu struktury ciekłej kropli podczas zwilżania powierzchni monokryształu jest jednym z nielicznych występujących w literaturze. Takie podejście pozwoliło zaobserwować tworzenie się stopu AgCu o strukturze amorficznej na podłożu Cu bez grafenu.

Skuteczność metody analizy Woronoja do opisu struktury ciekłych metali i stopów stało się motywacją do rozszerzenia zastosowania tej metody na materiały krystaliczne. W pracy A4 Habilitantka dokonała rozwinięcia metody analizy Woronoja dla materiałów w stanie stałym charakteryzujących się dużym stopniem nieuporządkowania, wliczając materiały polikrystaliczne. Zbadała strukturę oraz uporządkowanie granic ziaren (GB) w bikryształach i polikryształach Al. Ważnym elementem badań było rozważenie gęstości granicy ziarna, wyrażonej za pomocą parametru λ , oraz analiza uporządkowania atomów w celu wyznaczenia struktury i topologii sieci atomów granic ziaren jak również entropii konfiguracji dla GB o różnych kątach dezorientacji. Znaczącym osiągnięciem Habilitantki jest kategoryzacja wskaźników Woronoja na podstawie wyników uzyskanych dla bikryształu Al o różnych kątach dezorientacji, która pozwoliła na dokładne scharakteryzowanie uporządkowania GB i struktury bikryształu oraz dla polikryształu Al. Należy podkreślić, iż są to pierwsze takie doniesienia w literaturze. Ważnym osiągnięciem Habilitantki jest możliwość identyfikacji i opis „cech topologicznych” uporządkowania atomów, które pozwalają na poznanie struktury, topologii i uporządkowania atomów w granicy ziaren oraz ich zmian wywołanych nieregularnościami GB.

Zachęcona wcześniejszymi sukcesami, Habilitantka podejmuje się wykorzystania metody reaktywnej dynamiki molekularnej i analizy topologicznej do opisu struktury i kinetyki wzrostu cienkich warstw, filmów na podłożu krystalicznym w kontakcie z gazowym tlenem i podłożu amorficznym w kontakcie z roztworem wodnym. Cel ten realizuje, z jednej strony opisując aspekty topologiczne i strukturalne cienkich warstw tlenkowych, powstałych podczas utleniania podłoża Al (prace A5 i A6) a z drugiej strony koncentrując się na badaniach kontaktu utlenionego podłoża Al z wodnym roztworem o odczynie silnie kwaśnym i silnie zasadowym (praca A7). Habilitantka zbadała wpływ orientacji krystalograficznej podłoża Al na strukturę i właściwości warstwy tlenkowej. Badając kinetykę wzrostu warstwy tlenkowej w funkcji ciśnienia tlenu Habilitantka wykorzystwała reaktywne pole siłowe. Analizę topologiczną przeprowadziła za pomocą modelu jednostek strukturalnych typu „tetraedr” oraz metody analizy pierścieni. Istotnym wynikiem tych badań było pokazanie wpływu podłoża Al o orientacji (100) i (111) na strukturę i topologię sieci atomów i ich połączeń dla ultracienkiego tlenku powstającego na powierzchni Al wskutek utleniania gazowym tlenem w temperaturze 300 K. Istotnym rezultatem pracy jest wykazanie, że różnice w uporządkowaniu atomowym mają wpływ na strukturę i dla dwóch powstałych warstw tlenkowych wynikają z obecności naprężenia ściskającego na początkowych etapach utleniania powierzchni Al(111). Ważnym

wynikiem pracy A5 jest również zaobserwowanie istnienia motywu strukturalnego AlO_5 , w którym atomy Al mają pięciu sąsiadów. Według dostępnej literatury, jednostki AlO_5 można wykorzystać do wyznaczenia stopnia nieuporządkowania struktury w materiałach tlenkowych o strukturze amorficznej. W rezultacie Habilitantka potwierdziła, że mała zawartość jednostek AlO_5 sprzyja tworzeniu się uporządkowanej struktury tlenku powstałego na podłożu Al(111) pomimo mniejszej grubości warstwy. Natomiast duża zawartość jednostek AlO_5 przyczynia się do wzrostu nieuporządkowania, co zaobserwowała dla warstw tlenku powstałego na podłożu Al(100). Oba uzyskane wyniki pozostają w zgodności z dostępnymi danymi eksperymentalnymi i pozwalają zrozumieć wpływ obecności jednostek AlO_5 na przemianę fazową ze stanu amorficznego do krystalicznego.

W pracy A6 Habilitantka skupiła się na analizie uporządkowania atomów mostków tlenowych oraz klasterów AlO_5 i ich wpływu na strukturę tlenku powstałego na powierzchniach Al(100) i Al(111) w funkcji temperatury. Bardzo ważnym wynikiem pracy jest zbadanie roli konfiguracji mostków -O-O- na strukturę, grubość i skład chemiczny warstw tlenkowych. Analiza konfiguracji mostków tlenowych pozwoliła na uzyskanie informacji na temat rozmieszczenia porów w warstwach tlenku powstałych dla stałego ciśnienia tlenu w różnej temperaturze. Zaobserwowane zaburzenia strukturalne wynikają z obecności klasterów AlO_5 i istnienia sieci losowo rozmieszczonych jonów tlenu w amorficznych warstwach tlenku, co skutkuje wzrostem swobodnej objętości, a tym samym zmniejszeniem gęstości warstwy tlenku.

Praca A7 zamyka trzeci cel badań, dostarczając nowy opis struktury i topologii sieci atomów warstwy tlenkowej na powierzchni Al będącej w kontakcie z medium korozyjnym. Należy podkreślić, że nowo zaproponowana kategoryzacja wskaźników Woronoja dla wspomnianych warstw pozwoliła pokazać powstanie złożonej topologicznie sieci atomów i połączeń o strukturze amorficznej, nieprezentowanej dotychczas w literaturze.

Podsumowując, można stwierdzić, że badania przeprowadzone przez Habilitantkę w cyklu publikacji pozwoliły na uzyskanie spójnego i zwięzłego opisu uporządkowania atomowego w materiałach o zróżnicowanej strukturze, wykorzystując w tym celu metody dynamiki molekularnej i analizy topologicznej. Do najważniejszych osiągnięć przedstawionych w cyklu powiązanych tematycznie prac należą:

- wykazanie, że lokalne uporządkowanie ikosaedryczne bliskiego zasięgu (ISRO) ma korzystny wpływ na stabilizację stanu ciekłego, co wynika z ich gęsto upakowanej struktury i wpływu na zachowanie właściwości transportowych, termodynamicznych jak również kąt zwilżania i powierzchnię rozptyłu;
- zbadanie wpływu „*cech topologicznych*” uporządkowania atomowego na strukturę rdzenia granicy ziarna, jego grubość i zachowanie entropii konfiguracji;
- wykazanie, że obecność naprężenia ściskającego na początkowych etapach utleniania wpływa na różnicę w strukturze i uporządkowaniu topologicznym dla dwóch powstałych ultracienkich warstw tlenku na podłożu Al(100) i Al(111);
- wykazanie, że obecność klasterów AlO_5 i sieci losowo rozmieszczonych jonów tlenu w postaci mostków -O-O- w amorficznych warstwach tlenku powoduje wzrost swobodnej objętości, zmniejszenie gęstości warstwy tlenku oraz wzrost nieuporządkowania struktury;

- wykazanie, iż dynamika molekularna w połączeniu z analizą Woronoja otwiera nowe możliwości i perspektywy do badania zależności struktura-właściwości materiałów poddanych różnym czynnikom zewnętrznym.

Recenzent ma następujące uwagi do autoreferatu:

- Habilitantka wielokrotnie posługuje się enigmatycznym zwrotem „wnikliwa analiza”, nie objaśniając co się za tym stwierdzeniem kryje.
- Z oświadczeń współautorów wynika, że pomysł na pracę A3 powinien być dziełem Habilitantki, podczas gdy jest ona dopiero trzecim autorem. Jest to niezrozumiałe.
- Habilitantka w autoreferacie zbyt mało miejsca poświęciła omówieniu przyjętych założeń, które mają kluczowe znaczenie na uzyskane wyniki modelowania. Jest to szczególnie istotne w przypadku dzieła, na które składa się cykl publikacji.
- Niektóre postulaty wykorzystywane w obliczeniach dynamiki molekularnej w pewnych wspólnych obszarach mogłyby być potwierdzone innymi metodami, takimi jak np. obliczenia kwantowo-mechaniczne, metoda DFT. Jest to jednak raczej wskazówka na przyszłość niż zarzut.
- Habilitantka nie wspomina o narzędziach (programach), jakie wykorzystwała do modelowania.
- W autoreferacie znajdują się błędy językowe oraz terminologiczne, np. Habilitantka posługuje się wielokrotnie terminem „mostek tlenkowy”, czy „modelowanie atomistyczne”.

Przedstawione w cyklu publikacji wyniki badań spełniają wymóg, jakim jest posiadanie dorobku naukowego stanowiącego znaczny wkład w rozwój określonej dyscypliny. Bez wątplenia, mogą stwierdzić, że wkład Habilitantki w rozwój dyscypliny inżynieria materiałowa jest znaczny.

Ocena innych (poza cyklem publikacji) osiągnięć naukowych

Przed uzyskaniem stopnia doktora Habilitantka zajmowała się opisem struktury i właściwości ciekłych stopów Al-Zn z dodatkiem litu z wykorzystaniem modeli termodynamicznych oraz technik eksperymentalnych. Najważniejszym osiągnięciem naukowym przed uzyskaniem stopnia doktora było wykazanie tendencji tworzenia asocjatów w badanych ciekłych stopach z układu Al-Li-Zn oraz stopach z układów Al-Li i Li-Zn, które zostały potwierdzone badaniami eksperymentalnymi w połączeniu z modelowaniem termodynamicznym oraz wsparte wstępnymi badaniami z wykorzystaniem symulacji w skali atomowej. W rezultacie uzyskała opis zależności między strukturą a właściwościami termodynamicznymi i fizyko-chemicznymi dla ciekłych stopów z układu Al-Li-Zn oraz stopów z układu Al-Li i Li-Zn, które były słabo poznane w literaturze. Wnioski z prowadzonych badań i uzyskanych wyników w ramach pracy doktorskiej zostały opublikowane w 4 pracach z listy

JCR, w których Habilitantka jest autorem korespondencyjnym. Wyniki tych badań Habilitantka prezentowała na siedmiu konferencjach o zasięgu krajowym i międzynarodowym.

Po uzyskaniu stopnia doktora, oprócz badań przedstawionych w cyklu 7 prac będących podstawą do ubiegania się o stopień doktora habilitowanego, Habilitantka była zaangażowana w realizację trzech projektów badawczych.

Stopy z układów Li-Sb jak i Ag-Li-Sb jako potencjalne materiały anodowe do akumulatorów litowo-jonowych, były przedmiotem badań w ramach projektu badawczego Sonata (II.9.B3). Habilitantka zaproponowała nowe parametry do opisu właściwości termodynamicznych i strukturalnych ciekłych stopów z układu Li-Sb. Wykazała, że ciekłe stopy z układu Li-Sb wykazują tendencję do tworzenia asocjatów, gdzie asocjaty odpowiadające składowi chemicznemu fazy Li_3Sb są dominujące i wpływają na zachowanie cząstkowych funkcji termodynamicznych. W pracy (II.4.B2), Habilitantka wykazała, że uwzględnienie w modelu termodynamicznym asocjatów Li_3Sb znacząco poprawia korelację dla funkcji termodynamicznych pomiędzy danymi eksperymentalnymi i wyznaczonymi z modelowania termodynamicznego. Uzyskane wyniki pozwoliły zaobserwować wyraźną tendencję do tworzenia asocjatów dla ciekłych stopów z układu Li-Sb bogatych w Li potwierdzone również z wyznaczonego parametru uporządkowania chemicznego (parametru Warrena-Cowleya). Odmienną tendencję zaobserwowała dla ciekłych stopów z układu Li-Sb bogatych w Sb. Uzyskane wyniki zostały zaprezentowane na konferencjach o zasięgu międzynarodowym (II.7.B22). Głównym osiągnięciem tych badań było uzyskanie spójnego opisu korelacji pomiędzy właściwościami termodynamicznymi i strukturalnymi oraz wpływu asocjatów na zachowanie badanych właściwości ciekłych stopów z układu Li-Sb.

Habilitantka zaangażowała się także w badania, które realizowała we współpracy z dr Przemysławem Szafrąnskim (Collegium Medicum, Uniwersytet Jagielloński). Badania te dotyczyły opisu struktury substancji organicznych z wykorzystaniem spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego oraz zastosowania metod obliczeniowych do wyznaczenia przesunięć chemicznych w widmach protonowego rezonansu magnetycznego dla mieszanin diastereoizomerów pochodnych spirooksazolidyny, opisane w pracy (II.4.B3). Ponadto, do przewidywania przesunięć chemicznych, Habilitantka przeprowadziła obliczenia metodami DFT dla związków siarki na różnym stopniu utleniania, a uzyskane wyniki zostały przedstawione w pracy (II.4.B4). Przedstawione wyniki obliczeń metodami DFT pozwoliły na określenie stopnia utlenienia siarki w sekwencji tioeter-sulfotlenek-sulfon na podstawie przewidywania widm ^1H i ^{13}C NMR.

Trzecim tematem badań, którego podjęła się Habilitantka po uzyskaniu stopnia doktora była korozja obiektów muzealnych, głównie materiałów metalowych na osnowie Cu w oparciu o symulacje w skali atomowej. Badania te realizowała we współpracy z grupą badawczą prof. Ewy Bulskiej (Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych, Uniwersytet Warszawski), w ramach projektu badawczego CollectionCare Horizon 2020 „*Innovative and affordable service for the preventive conservation monitoring of individual cultural artefacts during display, storage, handling and transport*” (III.2.B2). W ramach projektu, Habilitantka opracowała model PC dla obiektów metalowych korzystając z danych uzyskanych z symulacji w skali atomowej i danych eksperymentalnych zmierzonych jak i dostępnych w literaturze. W swoim modelu Habilitantka uwzględniła, takie parametry jak: wilgotność powietrza, temperatura oraz rodzaj środowiska korozyjnego (CO_2 , NO_x i kwasu octowego). Model pozwala na identyfikację stopnia degradacji

obiektów metalowych w muzeach w oparciu o dane pochodzące z sieci inteligentnych czujników pomiaru temperatury i wilgotności powietrza.

Podsumowując, dorobek naukowy Habilitantki składa się z 15 prac naukowych opublikowanych w czasopiśmie z listy Journal Citation Reports, z których jedna jest pracą autorską natomiast w 14 pozostałych Habilitantka jest współautorem. Spośród 11 prac, które ukazały się po uzyskaniu stopnia naukowego doktora, w 9 Habilitantka jest autorem korespondującym, natomiast w 7 pracach jestem pierwszym autorem. Ponadto jest współautorem pięciu prac opublikowanych w materiałach pokonferencyjnych po uzyskaniu stopnia doktora. Artykuły w czasopiśmie z listy JCR indeksowane w bazie Web of Science były cytowane 150 razy (120 bez autocytowań), przy czym 116 z ogólnej liczby cytowań przypada na lata po uzyskaniu stopnia naukowego doktora. Indeks Hirscha, wg Web of Science wynosi 8. Na podkreślenie zasługuje fakt, że wśród 8 najczęściej cytowanych prac w całym dorobku znajdują się 4 prace z cyklu prac przedstawionych jako główne osiągnięcie naukowe Habilitantki. Sumaryczny Impact Factor czasopiśmie z listy JCR (zgodnie z rokiem wydania) wynosi **51,576**, w tym po uzyskaniu stopnia naukowego doktora **43,577**.

Podsumowując, Recenzent jest przekonany, że spełniony jest wymóg dotyczący osiągnięć/osiągnięć naukowych w rozumieniu Art. 219.

Ocena aktywności naukowej realizowanej w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej, w szczególności zagranicznej

Po uzyskaniu stopnia doktora, Habilitantka rozpoczęła nowy temat badawczy, dotyczący mechanizmu wzrostu warstw tlenkowych podczas utleniania termicznego podłoża Al i jego stopów. Badania te realizowała podczas stażu podoktorskiego w Królewskim Instytucie Technologicznym, (KTH Royal Institute of Technology), pod kierownictwem prof. Pavla Korzhavy'ego. Badania te były realizowane w ramach stypendium Carla Tryggersa „*Atomistic simulations of thermal and chemical oxidation of Al metal and Al-based alloys*” w latach 2017 i 2018. Wyniki tych badań zostały opublikowane i są częścią w cyklu prac A5 i A6 stanowiących osiągnięcie naukowe oraz były prezentowane na 6 konferencjach o zasięgu międzynarodowym. W ramach współpracy z prof. Pavlem Korzhavy'm Habilitantka była współorganizatorem sympozjum tematycznego pt „*Predicting Interface Structure and Dynamics – From Atomic- to Meso-Scale*” na Kongresie Inżynierii Materiałowej w Niemczech w roku 2018.

Podczas stażu podoktorskiego na KTH, Habilitantka była również wykonawcą w projekcie ALUX, którego liderem był Uniwersytet w Lund w konsorcjum z KTH oraz partnerem z sektora gospodarczego – grupa Hydro. Głównym tematem tego projektu była poprawa odporności na korozję materiałów zawierających glin. W ramach tego projektu Habilitantka zajmowała się opisem na poziomie atomowym mechanizmu utleniania i kinetyką wzrostu warstw tlenku na podłożach stopów Al, wykorzystując w tym celu dynamikę molekularną. Habilitantka, w ramach projektu ALUX, nawiązała współpracę z grupą badawczą profesora Edvina Lundgrena z Uniwersytetu w Lund, gdzie wygłosiła zaproszony referat, w którym przedstawiła mechanizm wzrostu warstwy tlenkowej na powierzchni Al i jego stopu oraz czasową zależność funkcji rozkładu atomów, co pozwoliło lepiej zrozumieć zjawiska

zachodzące na bardzo wczesnych etapach wzrostu warstwy mające istotny wpływ na formowanie się struktur na późniejszych etapach wzrostu.

Habilitantka nawiązała również współpracę z Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych Uniwersytetu Warszawskiego, a w szczególności z grupą badawczą prof. Ewy Bulskiej, będąc zatrudniona do realizacji projektu badawczego „*Innovative and affordable service for the preventive conservation monitoring of individual cultural artefacts during display, storage, handling and transport*” CollectionCare, Horizon 2020, jako adiunkt na Uniwersytecie Warszawskim. W tym projekcie było zaangażowanych 18 partnerów, w tym z sektora akademickiego i przemysłowego.

Habilitantka jest rozpoznawalna w międzynarodowym środowisku naukowym, czego wyrazem było powierzenie jej przewodniczenia sesji B6_6 „*Corrosion Engineering II*” na Konferencji EUROMAT 2021.

Dr Trybuła nawiązała także współpracę z Instytutem Paula Sherrera w Szwajcarii. Podczas 4 dniowej wizyty wygłosiła zaproszony referat pt: „*Multiscale description of structural and thermo-physical properties of liquid alloys*” i zapoznała się z dostępną infrastrukturą badawczą. Wspólnie z partnerem szwajcarskim planuje prowadzić badania struktury materiałów krystalicznych i materiałów warstwowych w Research with Neutrons and Muons, Instytut Paul Sherrer, Willingen, Szwajcaria.

Habilitantka nawiązała także współpracę z Uniwersytetem Aalto. Podczas tygodniowej wizyty przedstawiła możliwości współczesnej inżynierii materiałowej w zakresie analizy właściwości i struktury ciekłych stopów i materiałów metalicznych, gdzie wygłosiła referat na zaproszenie.

Habilitantka aktywnie współpracuje z ośrodkami naukowymi w kraju i zagranicą. Ta współpraca jest udokumentowana wspólnymi publikacjami, wystąpieniami konferencyjnymi i projektami badawczymi. Powyższe fakty skłaniają Recenzenta do stwierdzenia, że wymagania postawione w Art. 219 Ustawy są spełnione z naddatkiem.

Ocena osiągnięć dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę

W latach 2016-2020 Habilitantka była promotorem pomocniczym pracy doktorskiej mgr Moniki Bugajskiej, pt. „*Właściwości termodynamiczne stopów Ag-Li-Sb*” realizowanej w IMIM PAN. Obecnie pełni funkcję promotora pomocniczego dwóch prac doktorskich: mgr inż. Aleksandry Dybeł (planowany rok obrony 2024), której temat dotyczy badań zjawisk zachodzących na granicy ciec/ciało stałe oraz mgr inż. Arkadiusza Żydka (planowany rok obrony 2024), który dotyczy badań korozji podłoża metalicznych z naniesionymi powłokami organicznymi w oparciu o modelowanie w skali atomowej.

W roku 2019 była promotorem pracy magisterskiej Arkadiusza Żydka na Wydziale Inżynierii Materiałowej i Informatyki Przemysłowej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie, temat pracy: „*Impact of Grain boundary complexion on structural properties in aluminum alloy*”.

W roku 2017 Habilitantka była odpowiedzialna za praktyki trzech studentów studiów licencjackich z Wydziału Fizyki i Informatyki Uniwersytetu Jagiellońskiego. W latach 2017 –

2018 prowadziła staże naukowe dla 7 studentów z Akademii Górniczo-Hutniczej oraz Uniwersytetu Jagiellońskiego. W roku 2017 była również opiekunem 2,5 miesięcznej praktyki studenckiej Dominiki Wieczorek, w ramach programu ERASMUS, realizowanym w Królewskim Instytucie Technologicznym (KTH) w Sztokholmie, Szwecja.

Działalność organizacyjną i popularyzującą naukę Habilitantka realizowała na kilku polach. Czterokrotnie była współorganizatorem sympozjum w panelu *Modelling and simulations* (M) na kongresach Materials Science and Engineering w Niemczech w latach 2016, 2018, 2020 i 2022. Była członkiem Komitetu Organizacyjnego Konferencji TOFA 2022 o zasięgu międzynarodowym oraz członkiem komisji oceniającej wnioski o stypendia konferencyjne w konferencji TOFA 2022. W 2023 r. była członkiem zespołu organizacyjnego i realizującego Ogólnopolski Dzień Inżynierii Materiałowej w Instytucie Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN – pierwszego w skali Polski wydarzenia poświęconego nowoczesnym materiałom inżynierskim, metodom ich otrzymywania i badania, mającego przybliżyć pracę naukowców, poznać nowoczesne materiały oraz zachęcić dzieci i młodzież do podjęcia w przyszłości kształcenia na kierunku inżynieria materiałowa.

Podsumowując tą część dorobku dr Marceli Trybuły, oceniam ją jako wystarczającą.

Ocena współpracy z otoczeniem społecznym i gospodarczym

Recenzent doszukał się w autoreferacie wymiernych elementów współpracy z otoczeniem gospodarczym.

Podczas stażu podoktorskiego w KTH Habilitantka była wykonawcą w projekcie ALUX, realizowanego w konsorcjum z partnerem z sektora gospodarczego – grupa Hydro, który dotyczył poprawy odporności na korozję materiałów aluminiowych.

Habilitantka uczestniczyła w realizacji projektu badawczego „Innovative and affordable service for the preventive conservation monitoring of individual cultural artefacts during display, storage, handling and transport” CollectionCare, Horizon 2020, w który było zaangażowanych 18 partnerów, w tym z sektora przemysłowego. Habilitantka opracowała model szybkości korozji, który w formie kodu w języku Python został przekazany partnerowi przemysłowemu – firmie Atos celem wdrożenia.

Wśród innych osiągnięć Habilitantki na podkreślenie zasługują:

- trzyletnie stypendium DOCTUS – Małopolski fundusz dla doktorantów (2013-1015)
- stypendium CALPHAD, w ramach którego Habilitantka uczestniczyła w konferencji CALPHAD XLIV w Loano, Włochy
- kierownictwo projektu ETIUDA, który umożliwił odbycie 4 miesięcznego stażu naukowego pod opieką prof. Alain Pasturel z Uniwersytetu w Grenoble, Francja
- kierownictwo projektu Preludium NCN w latach 2012-2014

- *interdyscyplinarne studia doktoranckie z zakresu inżynierii materiałowej z wykładowym językiem angielskim*”, podczas których Habilitantka nawiązała współpracę z Prof. Alain Pasturel i Prof. Noel Jakse z Uniwersytetu w Grenoble, Francja
- kierownictwo projektu SONATA
- wykonawca w 3 projektach badawczych finansowanych przez Narodowe Centrum Nauki
- ogłoszenie „na zaproszenie” 3 seminariów o zasięgu krajowym i międzynarodowym
- realizacja współpracy z ośrodkami naukowymi na całym świecie, a w szczególności: KTH, Szwecja; LANL, USA; Federal Institute for Materials Research and Testing, BAM, Niemcy
- realizacja współpracy krajowej, m.in. z Wydziałem Farmaceutycznym Collegium Medicum Uniwersytetu Jagiellońskiego; z Wydziałem Inżynierii Materiałowej i Ceramiki AGH oraz z Instytutem Metali Nieżelaznych Sieć Łukasiewicz Oddział w Skawinie
- laureatka stypendium Carla Trygerssa oraz trzyletniego stypendium Ministra Edukacji i Nauki dla wybitnych młodych naukowców
- otrzymała Brązowy Krzyż Zasługi za osiągnięcia naukowe nadany przez Prezydenta Rzeczypospolitej Polskiej
- od roku 2020 jest członkiem panelu doradczego w czasopiśmie Crystals, MDPI
- recenzent 31 prac na zlecenie redakcji czasopism naukowych, m.in.: the 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

Wniosek końcowy

Ocena osiągnięć naukowych dr Marceli Trybuły ubiegającej się o stopień doktora habilitowanego w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych w dyscyplinie inżynieria materiałowa pozwala sformułować następujące wnioski:

1. W zakresie oceny cyklu powiązanych tematycznie prac pt. *„Struktura materiałów krystalicznych, amorficznych i ciekłych na poziomie atomowym w ujęciu metod dynamiki molekularnej i analizy topologicznej”*, jako głównego osiągnięcia habilitacyjnego stwierdzam, że przedstawione wyniki badań wyczerpują podstawowy wymóg, jakim jest posiadanie w

dorobku osiągnięcia naukowego, stanowiącego znaczny wkład w rozwój inżynierii materiałowej. Co więcej, „znaczny wkład” można bez wątplenia przypisać dr Trybule, która ubiega się o stopień doktora habilitowanego.

2. W zakresie oceny innych (poza cyklem powiązanych tematycznie prac) osiągnięć naukowych Recenzent uważa, że opublikowane prace, a także fakt wiodącej roli Habilitantki w większości publikacji, prezentacje wyników badań na konferencjach o zasięgu krajowym i międzynarodowym oraz zaproszone wykłady spełniają przesłanki dotyczące innego osiągnięcia/osiągnięć naukowych w rozumieniu Art. 219 Ustawy.

3. W zakresie oceny aktywności naukowej realizowanej w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej, w szczególności zagranicznej, Recenzent uważa, że Habilitantka spełnia z nadatkiem wymagania postawione w Art. 219 Ustawy.

4. W zakresie oceny osiągnięć dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę, a także współpracy z otoczeniem społecznym i gospodarczym, osiągnięcia dr Marceli Trybuły są na poziomie stawianym osobom ubiegającym się o stopień doktora habilitowanego.

Pani dr Marcela Trybała jest młodym uzdolnionym naukowcem, który spełnia wszystkie przesłanki warunkujące nadanie stopnia doktora habilitowanego i wymagania określone w Art. 219 ust. 1 pkt 1-3 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz.U.2018 poz. 1668, z późn. zm.).

Zatem, oceniam pozytywnie wniosek dr Marceli Trybuły, ubiegającej się o stopień doktora habilitowanego w Dziedzinie Nauki Inżynieryjno-Techniczne w Dyscyplinie Inżynieria Materiałowa.

A handwritten signature in blue ink, consisting of several overlapping loops and a long horizontal stroke extending to the right.