

**Protokół z posiedzenia Komisji ds. habilitacji dr. Mariany DERZSI
powołanej przez Centralną Komisję ds. Stopni i Tytułów
w dniu 6 lutego 2014 r.**

W dniu 9 maja 2014 roku Komisja Habilitacyjna odbyła posiedzenie w składzie:

1. Przewodniczący Komisji – Prof. dr hab. Andrzej Jeziński – Instytut Fizyki Molekularnej PAN
2. Sekretarz Komisji – Prof. dr hab. Paweł Kowalczyk – Uniwersytet Warszawski
3. Recenzent Komisji – Prof. dr hab. Piotr Bogusławski – Instytut Fizyki PAN
4. Recenzent Komisji – Prof. dr hab. Renata Świrkowicz – Politechnika Warszawska
5. Recenzent Komisji – Prof. dr hab. Jacek Majewski – Uniwersytet Warszawski
6. Członek Komisji – Prof. dr hab. Stanisław Krukowski – Instytut Wysokich Ciśnień PAN
7. Członek Komisji – Prof. dr hab. Marek Trippenbach – Uniwersytet Warszawski.

Komisja zapoznała się z recenzjami rozprawy habilitacyjnej pt.: "Struktura elektronowa, magnetyczna i krystaliczna oraz dynamika sieci wybranych związków późnych metali przejściowych" i stwierdziła, że wszystkie trzy recenzje są jednoznacznie pozytywne.

W wyniku obrad Komisja podjęła w głosowaniu jawnym następującą uchwałę:

Uchwała Komisji ds. Habilitacji dr. Mariany Derzsi

Po zapoznaniu się z rozprawą habilitacyjną pt. „Struktura elektronowa, magnetyczna i krystaliczna oraz dynamika sieci wybranych związków późnych metali przejściowych”, stanowiącą cykl siedemnastu publikacji, z autoreferatem, wykazem opublikowanych prac naukowych i referatów, informacji o działalności dydaktycznej i innej związanej z fizyką, oświadczeniami dotyczącymi indywidualnego wkładu habilitanta, oświadczeniami współautorów i trzema recenzjami oraz po przeprowadzeniu dyskusji, Komisja wnioskuje do Rady Naukowej Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego o nadanie dr Marianie Derzsi stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk fizycznych w dyscyplinie fizyka.

Uzasadnienie

Dr Mariana Derzsi ukończyła studia na Wydziale Matematyki, Fizyki i Informatyki Uniwersytetu Komeńskiego w Bratysławie (Słowacja) w roku 2002. Pracę magisterską pt.: „Laser induced fluorescence and optical coherent tomography as tools for scanning of upper layers of skin” wykonała pod kierunkiem prof. Dusana Chorvata. Stopień doktora otrzymała w Instytucie Chemii Nieorganicznej Słowackiej Akademii Nauk w Bratysławie w roku 2007 za rozprawę doktorską pt.: „Structure and dynamics of selected hydrogen bonded molecules: inelastic neutron scattering, neutron diffraction and DFT study”. Promotorami rozprawy doktorskiej byli dr Lubomir Smrčok i prof. Pavel Mach.

W latach 2007-2009 dr Mariana Derzsi była adiunktem w Instytucie Chemii Nieorganicznej Słowackiej Akademii Nauk w Bratysławie.

W roku 2008 odbyła staż podoktorski w Instytucie Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego Polskiej Akademii Nauk w Krakowie. W latach 2009-2012 przebywała na stażu podoktorskim w Interdyscyplinarnym Centrum Modelowania Matematycznego i Komputerowego (ICM, 2009-2011) oraz w Centrum Nowych Technologii (CeNT, 2012) Uniwersytetu Warszawskiego. Od roku 2012 jest zatrudniona na stanowisku adiunkta w Centrum Nowych Technologii UW.

Przedstawiona do oceny rozprawa habilitacyjna poświęcona jest badaniom struktury elektronowej, właściwości magnetycznych oraz dynamice sieci wybranych związków późnych metali przejściowych. Habilitantka zastosowała metody teoretyczne oparte o teorię funkcjonału gęstości (DFT).

Rozprawę habilitacyjną stanowi cykl siedemnastu prac naukowych opublikowanych w czasopiśmie: Physical Review B (2), Journal of Physics: Condensed Matter (1), European Journal of Inorganic Chemistry (3), Inorganic Chemistry (1), Angewandte Chemie (International Edition) (1), Vibrational Spectroscopy (1), Chemistry A European Journal (1), Journal of Molecular Modeling (1) Crystengcomm (2), Dalton Transactions (4).

Wszystkie recenzje kończą się stwierdzeniem, że dorobek naukowy dr Mariany Derzsi spełnia ustawowe kryteria stawiane rozprawom habilitacyjnym oraz poparciem wniosku o nadanie dr Marianie Derzsi stopnia naukowego doktora habilitowanego.

Prof. Piotr Bogusławski pisze w recenzji „Wspólnym mianownikiem przedstawionego cyklu prac są nie tylko jony żelaza, srebra i niklu, lecz warsztat naukowy, czyli obliczenia „z pierwszych zasad” bazujące na przybliżeniu lokalnej gęstości, i poprawkach +U. Podejście to pozwala na obliczenie energii stanu podstawowego układu, co w następnym kroku otwiera bogate możliwości wyznaczenia struktury elektronowej, krystalicznej, widm fononowych, struktury magnetycznej, czy dynamiki molekularnej. Pani Derzsi wykorzystwała większość owych możliwości, prowadząc kompleksowe badania rozpatrywanych związków, znajdując

relacje pomiędzy własnościami atomów tworzących związek a strukturą krystaliczną (określoną przez typ wiązań) i magnetyczną. Tak więc w swojej pracy pani Derzsi nie poszerzała możliwości warsztatowych, czyli nie opracowała nowych kodów, lecz korzystała z istniejących pakietów obliczeniowych. Tu należy podkreślić, że czyni tak obecnie wiele osób, lecz w dużej części prac metody stosowane są bez zrozumienia, a otrzymane wyniki nie są poprawnie interpretowane. Nie jest to przypadek pani Derzsi.” W końcowej części recenzji Recenzent pisze:” Dorobek pani Mariany Derzsi, uzyskany w ciągu 6 lat po doktoracie, jest bogaty. Pani Derzsi jest współautorką 27 publikacji, cytowanych w sumie ponad 150 razy, z czego 22 to publikacje po uzyskaniu stopnia doktora, czyli w okresie 6 lat. Jej indeks Hirscha wynosi 7. Prace te są opublikowane w czasopismach o wysokim Impact Factorze. Liczba cytowań wynika po części z faktu, iż są to publikacje z ostatnich 2-3 lat. Dorobek publikacyjny uważam więc za w pełni zadawalający. Poza publikacjami dorobek pani Derzsi zawiera 20 referatów i 4 postery na konferencjach, oraz jeden wykład zaproszony na Szkole Rozpraszania Neutronów na Słowacji. Brała ona lub bierze udział w realizacji 6 projektów badawczych jako wykonawca. Działalność dydaktyczna pani Derzsi obejmuje opiekę promotorską nad jedną pracą inżynierską i jedną pracą magisterską, wykład prowadzony na UW, a także dwa wykłady na szkołach letnich, oraz działalność popularyzatorską.”

Prof. Renata Świrkowicz pisze „Badania prowadzone przez dr M. Derzsi mają charakter interdyscyplinarny, są to badania z pogranicza fizyki i chemii. Obliczenia z zasad pierwszych miały na celu opisanie i zrozumienie właściwości nowych materiałów, zbadanie charakteru oddziaływań magnetycznych, polimorfizmu, przejść fazowych, a także wpływu wysokich ciśnień na te właściwości.” I dalej „Badania Habilitantki pozwoliły na opisanie mechanizmów prowadzących do pojawiania się uporządkowania magnetycznego danego typu, wyznaczenie stałej nadwymiany, której wartość porównano następnie z wielkością wyznaczoną eksperymentalnie dla danego materiału.”, i dalej „Na szczególne podkreślenie zasługuje fakt, iż badania prowadzono kompleksowo i w wielu aspektach. W pracach wyraźnie widoczne są interakcje pomiędzy eksperymentem i teorią.” Prof. Świrkowicz podkreśla w recenzji udział Habilitantki w projektach badawczych, pisząc „Dr Mariana Derzsi uczestniczyła w realizacji kilku znaczących projektów badawczych finansowanych przez NCN i Slovak Grant Agency, jak również w projekcie Marie Curie oraz w projekcie TEAM”.

W końcowej części recenzji prof. Świrkowicz pisze „Z pełnym przekonaniem mogę stwierdzić, iż prace będące podstawą ubiegania się dr Derzsi o stopień doktora habilitowanego, w których zawarto dogłębną analizę właściwości wybranych związków metali przejściowych, znacznie wzbogaciły rodziny tych związków, a uzyskane wyniki są cenne z poznawczego punktu widzenia. Kompleksowe badania teoretyczne i eksperymentalne pozwoliły na zrozumienie ich właściwości i opisanie mechanizmów sprzężenia magnetycznego w tych złożonych układach.” W podsumowaniu prof. Świrkowicz pisze „Reasumując stwierdzam, iż wybrane prace i dorobek naukowy dr Mariany Derzsi obejmują cały szereg ciekawych i aktualnych tematów badawczych, wskazują też na jej dojrzałość naukową i samodzielność w prowadzeniu badań, a otrzymane rezultaty są cenne z poznawczego punktu widzenia.”

Prof. Jacek Majewski pisze w swojej recenzji: „Chciałbym podkreślić, że dr M. Derzsi w przeprowadzonych obliczeniach posługuje się metodami stanowiącymi najnowsze trendy w obliczeniowej fizyko-chemii badanych związków, wykazuje duży talent w wyekstrahowaniu fundamentalnych mechanizmów fizycznych. Jej prace stanowią olbrzymi wkład do poznania tych niezwykle intrygujących układów materiałowych. Wszystkie prace wchodzące w skład monotematycznego zbioru wnoszą znaczący wkład do fizyki ciała stałego, świadczą również o dużej dojrzałości naukowej Habilitanta w stawianiu ważnych problemów naukowych i ekstrahowaniu nowej intrygującej fizyki z wyników przeprowadzonych obliczeń numerycznych”. Dalej prof. J. Majewski pisze „W podsumowaniu, najwyżej oceniam działalność naukową dr Mariany Derzsi przejawiającą się znaczącymi publikacjami w renomowanych czasopismach międzynarodowych. Dr Mariana Derzsi jest autorką znaczących prac naukowych, wiele wnoszących do fizyki materii skondensowanej”.

Recenzje zawierają kilku uwag krytycznych oraz komentarzy.

Prof. P. Bogusławski pisze „Szersze spojrzenie na osiągnięte wyniki przedstawione jest w III części Dokumentacji, będącej de facto autoreferatem. Znajduje się tu parę nie całkiem zrozumiałych dla mnie stwierdzeń, takich jak 'cykl poświęcony jest kryształom z silnymi oddziaływaniami elektronowymi', nie wydaje mi się bowiem, by rozpatrywane związki charakteryzowały się oddziaływaniami ponadprzeciętnie silnymi. Autorka nie wyjaśnia też na czym polega 'funkcjonalność' rozpatrywanych związków srebra i niklu, które nie są szczególnie stabilne, a perspektywa ich zastosowań jest mało realistyczna.” Omawiając wyniki dr M. Derzsi prof. P. Bogusławski pisze „Metody obliczeniowe nie zostały jednak w autoreferacie omówione bardziej szczegółowo i krytycznie. Brak mi więc refleksji nad np. dokładnością DFT w kontekście badanych problemów, omówienia powodów wyjścia poza przybliżenie GGA, czy też zbiorczego porównania dokładności LDA i GGA.”

Prof. R. Świrkowicz pisze „... prezentacja wyników, którą zawarto w przewodniku jest schematyczna i mało interesująca. Autorka ograniczyła się do zrelacjonowania otrzymanych rezultatów, przedstawia je w formie krótkiego streszczenia prac stosując metodę, można rzec, copy+paste”.

Poza wspomnianymi wyżej nielicznymi uwagami krytycznymi, recenzenci wysoko oceniają rozprawę habilitacyjną dr Mariany Derzsi.

Jednoznacznie pozytywną ocenę habilitacji i dorobku naukowego dr Mariany Derzsi wyrażają też zgodnie wszyscy trzej recenzenci we wnioskach końcowych swoich opinii, które przytaczamy w całości.

Prof. P. Bogusławski „Podsumowując, uważam że dorobek dr Mariany Derzsi spełnia ustawowe kryteria stawiane rozprawom habilitacyjnym. Popieram więc wniosek o nadanie pani dr Mariannie Derzsi stopnia naukowego doktora habilitowanego”.

Prof. R. Świrkowicz pisze „Moim zdaniem spełnione są wymagania stawiane pracom habilitacyjnym i wnioskuję o pozytywną weryfikację dr Mariany Derzsi w zakresie nadania jej stopnia naukowego doktora habilitowanego.”

Prof. J.A. Majewski pisze „Stwierdzam, że Pani dr Mariana Derzsi całkowicie spełnia wymagania stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego, zgodnie z Ustawą z dnia 14 marca 2003 o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule z zakresie sztuki (Dz.U. br 65, poz.595, z późn. zm.) oraz Rozporządzeniem Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 1 września 2011, w sprawie kryteriów oceny osiągnięć osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego (Dz. U. nr. 196. Poz.1165).”

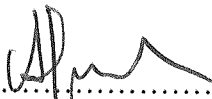
Konkluzja

Oceniana praca habilitacyjna istotnie poszerza wiedzę o strukturze elektronowej, właściwościach magnetycznych i dynamice sieci wybranych związków niklu, żelaza i srebra. Obliczenia teoretyczne dostarczyły wiele interesujących nowych rezultatów, które są ściśle powiązane z wynikami eksperymentalnymi.

Podsumowując Komisja stwierdza, że habilitantka spełnia ustawowe wymagania stawiane kandydatom do stopnia naukowego doktora habilitowanego.

Podpisy :

Prof. dr hab. Andrzej Jezierski

.....


Prof. dr hab. Paweł Kowalczyk

.....


Prof. dr hab. Piotr Bogusławski

.....


Prof. dr hab. Renata Świrkowicz

.....


Prof. dr hab. Jacek Majewski

.....


Prof. dr hab. Stanisław Krukowski

.....


Prof. dr hab. Marek Trippenbach

.....
