

Prof. dr hab. Włodzimierz Jaskólski
Instytut Fizyki, Uniwersytet Mikołaja Kopernika
w Toruniu

**Opinia na temat osiągnięcia naukowego oraz dorobku i aktywności
w zakresie badawczym i dydaktycznym
w postępowaniu habilitacyjnym dr. Nevilla Gonzaleza Szwackiego**

I. Ocena osiągnięcia naukowego

Przedstawione do oceny osiągnięcie naukowe to jednotematyczny cykl ośmiu publikacji zatytułowany „*Badanie wpływu domieszek metali przejściowych na własności klasycznych półprzewodników metodą obliczeń z pierwszych zasad*”. Wszystkie publikacje powstały w jedenastoletnim okresie 2007-2017. W jednej publikacji (H8) habilitant jest jedynym autorem a w czterech innych jest pierwszym autorem. Większość publikacji ukazała się w czasopismach o IF powyżej 2, w tym pięć w Phys. Rev. B. W wieloautorskich publikacjach habilitant określa zwykle swój wkład powyżej 30%. W pracach, w których autorów jest co najwyżej trzech ten wkład oceniany jest na 70-80%. Do dokumentacji dołączono oświadczenia współautorów. Publikacje H1, H2, H3 i H6 mają zawartość tylko obliczeniową, oświadczenia współautorów potwierdzają dominujący wkład habilitanta w ich powstanie. Prace H4, H5 i H7 dotyczą przede wszystkim eksperymentów uzupełnionych analizą obliczeń wykonanych przez habilitanta. Zawartość merytoryczna tych publikacji i znaczenie obliczeń (które wykonał habilitant) w ich powstanie wskazuje, że wkład obliczeniowy wykonany przez dr. N. Gonzaleza Szwackiego może być zbliżony do 30%. Jednak w publikacjach H4 i H5 autorów jest trzynastu i osiemnastu; ocena wkładu habilitanta, odpowiednio na 40% i 35% oznacza, że pozostali autorzy (których jest wielu i którzy przygotowywali próbki, wykonali eksperymenty, analizowali ich wyniki i uczestniczyli w redagowaniu publikacji) wnosili średnio nie więcej niż 5% na osobę w powstanie tych prac. Piszę o tym ponieważ uważam, że procentowe obliczanie wkładu przy więcej niż dziesięciu współautorach mija się z celem.

Publikacje składające się na osiągnięcie habilitacyjne doczekały się 72 cytowań; dwie najnowsze prace z lat 2015 i 2017 nie zostały jak dotąd w ogóle zacytowane, słabo cytowane (2 i 4 razy) są też dwie najstarsze publikacje z 2007 i 2008. Najwięcej, bo łącznie 26 razy cytowana była (pierwszoautorska) publikacja H3 z 2011r., niezły wynik uzyskały też publikacje w Phys. Rev. B z 2011 r. i w Sci. Rep. z 2012r., odpowiednio 14 i 17 cytowań. Można powiedzieć, że w zasadzie tylko połowa prac z cyklu habilitacyjnego uzyskuje oddźwięk w społeczności naukowej.

Poniżej pokrótce odniosę się do osiągnięć przedstawionych w ośmiu pozycjach składających się na osiągnięcie habilitacyjne, w kolejności ich powstawania.

Czysto teoretyczne publikacje H1 i H2 poświęcone są zagadnieniom stanów pułapkowych oraz par {F,H}, {F,B} i kompleksów {F,H_n} w krzemie. Wykonane obliczenia sugerują, że próba usuwania stanów pułapkowych w krzemie powiązanych z obecnością żelaza, poprzez pasywowanie wodorem może nie być skuteczna, ale jednocześnie może prowadzić do wypierania żelaza międzywęzłowego z par {F,B}. W pracy H2 postawiono też bardzo ciekawą hipotezę, że niektóre jony żelaza w krzemie domieszkowanym na typ n, interpretowane w eksperymentach EPR jako międzywęzłowe, mogą pochodzić z pozycji podstawieniowej z wodorem obracającym się wokół jonu żelaza.

W publikacji H3 badano GaN o strukturze wurcytu i blendy cynkowej, domieszkowany jonami Cr, Mn i Fe. Najważniejszym wynikiem jest potwierdzenie obserwowanego eksperymentalnie agregowania jonów magnetycznych zajmujących miejsca galu. Potwierdzono także, że jony żelaza mają tendencję do agregowania się na powierzchni wz-GaN oraz wyjaśniono dlaczego takie klastrowanie nie występuje w przypadku jonów manganu. Badano też magnetyczne uporządkowanie klastrów i pokazano, że ferromagnetyczne uporządkowanie jonów Fe w objętości kryształu zmienia się na anty-ferromagnetyczne na jego powierzchni. Jest to bardzo interesująca i cenna praca habilitanta.

Kolejne dwie prace H4 i H5 poświęcone są zagadnieniom kodomieszkowania jonami magnezu kryształów azotku galu domieszkowanych żelazem albo manganem. Są to prace doświadczalno-teoretyczne. W H4 zbadano wpływ jonów Mg na rozkład jonów żelaza w GaN. W części doświadczalnej wykazano, że jednorodnie domieszkowanie magnezem zmniejsza wydajność wbudowywania się jonów żelaza, co w efekcie prowadzi do zmiany właściwości magnetycznych z ferromagnetycznych (bez kodomieszkowania magnezem) do paramagnetycznych. Obliczenia wykonane przez habilitanta częściowo potwierdziły wyniki eksperymentu. Pokazały też, że obecność jonów magnezu zwiększa wydajność agregacji jonów żelaza na powierzchni wzrostu wz-GaN, potwierdzając znów rezultaty badań eksperymentalnych. Część teoretyczna pracy została poszerzona o analizę kodomieszkowania krzemem, która pokazała że krzem ułatwia wbudowywanie jonów Fe w sieć GaN i zapobiega agregacji jonów żelaza. W znakomitej publikacji H5 pokazano, że poprzez kodopowanie GaN:Mn magnezem uzyskuje się szerokozakresową kontrolę nad stanami ładunkowymi i spinowymi jonów Mn^{nt}. Obliczenia pokazały, że efekt ten jest wynikiem tworzenia się kompleksów Mn-Mg. Część teoretyczna jest w tej pracy bardzo istotna, a uzyskane w wyniki mogą mieć znaczenie aplikacyjne w optoelektronice i nowej gałęzi nanoelektroniki – solotronice.

Badanie wpływu domieszkowania GaN:Mn krzemem habilitant kontynuował w pracy H8. Autor pokazał, że krzem powoduje powstawanie kompleksów Mn-Si w podsieci kationowej i potwierdził wyniki doświadczeń wskazujące na wpływ krzemu na bardziej jednorodny rozkład centrów paramagnetycznych Mn w GaN.

W publikacji H6 autorzy badali wpływ ciśnienia hydrostatycznego na właściwości elektronowe i magnetyczne Ga_{1-x}Mn_xAs dla różnych koncentracji manganu. Oprócz

ciekawych wyników dotyczących położenia poziomów energetycznych Mn i hybrydyzacji ich orbitali 3d z walencyjnymi orbitalami 4p arsenu w funkcji ciśnienia, autorzy pokazali też, że temperatura Curie rośnie wraz ze wzrostem ciśnienia i przy ciśnieniu 14 GPa GaMnAs wykazuje własności ferromagnetyczne w temperaturze pokojowej. Warto podkreślić, że ciśnieniowe badania rozcieńczonych półprzewodników magnetycznych mogą przyczynić się do lepszego zrozumienia mechanizmów oddziaływania pomiędzy jonami magnetycznymi i służyć testowaniu modeli ferromagnetyzmu takich układów.

Doświadczalno-teoretyczna praca H7 poświęcona jest badaniu roli domieszek Mn w epitaksjalnych kryształach $Al_xGa_{1-x}N$ z koncentracją glinu dochodzącą nawet do 100%. Zarówno badania doświadczalne jak i teoretyczne wskazują, że atomy galu i glinu są w strukturze rozłożone przypadkowo niezależnie od koncentracji Al, a jony manganu mają tendencję do podstawiania atomów galu. Ze względu na wartości parametrów sieciowych oraz większą hybrydyzację orbitali, AlGa:Mn staje się materiałem interesującym z punktu widzenia zastosowań spintronicznych.

Zarówno w cyklu prac przedstawionych jako osiągnięcie habilitacyjne jak i we wszystkich pozostałych publikacjach, dr Gonzalez Szwacki biegle posługuje się zaawansowanym aparatem obliczeniowym fizyki molekularnej i ciała stałego. Używa szeregu różnych pakietów obliczeniowych DFT (SIESTA, VASP, QUANTUM-ESPRESSO) z odpowiednimi potencjałami korelacyjno-wymiennymi i różnymi bazami funkcyjnym; w obliczeniach stosuje formalizm funkcji Greena oraz symulacje Monte Carlo. Posiada przy tym dużą wiedzę nt. fizycznych procesów zachodzących w badanych układach. Dzięki temu uzyskane przez niego wyniki są wiarygodne w dobrej zgodności z rezultatami eksperymentów.

II. Ocena dorobku i aktywności naukowej, dydaktycznej, popularyzatorskiej oraz w zakresie współpracy międzynarodowej

A. Dorobek i aktywność naukowa

Na pozahabilitacyjny dorobek dr. Nevilla Gonzaleza Szwackiego składają się 22 publikacje w recenzowanych i punktowanych czasopismach naukowych, jeden (dwukrotnie wydany) podręcznik w języku angielskim i dwa rozdziały w książkach naukowych. Publikacje te doczekały się już poważnej liczby blisko siedmiuset cytowań i złożyły się na indeks $H=12$. Kilka z nich zostało zacytowane ponad 50 razy a praca z 2008 roku poświęcona fulerenom B-80 zbudowanym z atomów boru ma już ponad 300 cytowań. W sumie jest to wynik zadawalający jak na 20 lat pracy naukowej.

Spektrum pozahabilitacyjnych badań dr. Gonzaleza Szwackiego jest bogate i zróżnicowane. Najwięcej miejsca zajmują w nim badania dotyczące wielu różnych związków z Borem, poświęcone m.in. fulerenom i nanorurkom borowym, borozenom i borofenom. Ten nurt badań jest bardzo interesujący i nowatorski i przyniósł habilitantowi najwięcej cytowań, aż szkoda, że to nie on był podstawą habilitacji.

Znaczna część publikacji habilitanta to prace ściśle teoretyczno-obliczeniowe z tzw. pierwszych zasad (piszę „tzw.”, gdyż osobiście nie uważam za takie metod DFT, choć jest to powszechnie przyjęty pogląd). Sporo publikacji to prace z grupami doświadczalnymi, w których wkład obliczeniowy jest bardzo ważny. Prace habilitanta nie ograniczają się tylko do badania własności strukturalnych i elektronowych związków, którymi się zajmuje, ale dotyczą także ich właściwości optycznych. Podsumowując, uważam pozahabilitacyjny dorobek dr. Gonzaleza Szwackiego za poważny i bardzo wartościowy.

Dobrze wyglądają też inne aspekty aktywności naukowej dr. Gonzaleza Szwackiego. W czasie swojej kariery naukowej kierował dwoma projektami badawczym NCN (OPUS) i pełnił rolę wykonawcy w trzech innych projektach finansowanych przez NCN oraz 7. Program Ramowy. Wygłosił 21 referatów na krajowych i zagranicznych konferencjach naukowych o międzynarodowym zasięgu w tym 3 referaty zaproszone; wyniki swoich badań prezentował też kilkanaście razy w formie plakatów. Ponadto wygłosił cztery referaty zaproszone w innych ośrodkach naukowych, trzy za granicą w USA, we Włoszech i w Wenezueli oraz jeden na Uniwersytecie Szczecińskim.

Działalność badawcza habilitanta jest rozpoznawana w naukowym świecie. Świadczy o tym m.in. fakt częstego powierzania mu recenzowania artykułów przez wiele czasopism, w tym także prestiżowych, jak np. Chemical Society Reviews, Journal of Material Chemistry, ACS Nano, Scientific Reports, czy Computer Physics Communications. Dr Gonzalez Szwacki recenzował też projekt badawczy na zlecenie NCN oraz Rady Naukowej Katolickiego Uniwersytetu w Leuven. Wykonał ekspertyzę dla firmy NESTA-INSTAL dotyczącą optymalizacji spalania komorowego w wysokogradentowym polu magnetycznym. Od 2018 jest członkiem zespołu ekspertów NAWA w trzech programach dotyczących mobilności, oferty dydaktycznej i umiędzynarodowienia uczelni.

B. Współpraca międzynarodowa

W latach 2004-2009 habilitant odbył trzy długoterminowe staże podoktorskie, najpierw na Rice University w Huston, w USA a następnie na Uniwersytecie Technicznym w Teksasie i w Southern University w Huston. Z tego okresu pochodzi szereg bardzo dobrych i wielokrotnie cytowanych publikacji. Po roku 2010 współpraca z tymi ośrodkami nie jest już kontynuowana, jednak kilka prac, które powstały w latach 2011, 2012 i 2015 wskazuje na pewną współpracę z ośrodkami w Linz w Austrii oraz w Grenoble i Tuluzie we Francji.

C. Osiągnięcia dydaktyczne i w zakresie popularyzacji

Ze względu na fakt, że od początku swojej kariery naukowej habilitant zatrudniony był w Instytucie Fizyki PAN w Warszawie i w międzyczasie 5 lat spędził na stażach podoktorskich w uniwersytetach w USA, jego dorobek dydaktyczny jest z

naturalnych przyczyn skromny. Niemniej jednak warto odnotować, że sporadycznie prowadził ćwiczenia do wykładów mechaniki kwantowej-2, fizyki ciała stałego, modelowania nanostruktur i materiałów, struktury elektronowej ciał stałych i metod numerycznych, na Uniwersytecie Warszawskim, Uniwersytecie Kardynała Stefana Wyszyńskiego i Szkole Nauk Ścisłych PAN. Poza tym, w czasie pobytu na Uniwersytecie Rice w USA prowadził wykład „Physical properties of solids”. Do osiągnięć dydaktycznych należy też zaliczyć współautorstwo podręcznika do krytalografii „Basic elements of crystallography” wydanego dwa razy przez pan stanford publishing. Jest promotorem pomocniczym doktoranta w Instytucie Fizyki Teoretycznej Wydziału Fizyki UW; był też promotorem pracy licencjackiej na tym samym uniwersytecie.

Dr Nevill Gonzalez Szwacki posiada też pewien dorobek w zakresie popularyzacji: dwukrotnie współorganizował pokazy podczas Pikniku Naukowego oraz na Festiwalu Nauki i od czterech lat przygotowuje młodzież szkolną do matury międzynarodowej z fizyki w ramach programu *International Baccalaureate Diploma*.

Podsumowanie

Dr Nevill Gonzalez Szwacki jest niewątpliwie bardzo dobrym specjalistą teoretykiem-obliczeniowcem prowadzącym badania w ważnych naukowo obszarach fizyki ciała stałego, fizyki półprzewodników, półprzewodników magnetycznych i nanoukładów. Ważnym aspektem jego działalności jest umiejętność współpracy z grupami doświadczalnymi. Dorobek publikacyjny habilitanta jest solidny choć niezbyt dynamiczny. Od początku swojej kariery naukowej publikuje średnio 2-3 prace rocznie; w najlepszym okresie końcowego pobytu na stażu naukowym w USA było to 5 publikacji w 2008r. Całość dorobku z jego merytoryczną zawartością spełnia warunki niezbędne do uzyskania habilitacji. Dziwi nieco fakt, że dorobek ten, choć parametrycznie w zupełności wystarczający do ubiegania się o stopień doktora habilitowanego, uzyskany został w okresie znacznie dłuższym (16 lat) niż zwyczajowy jaki upływa od doktoratu do habilitacji. Niemniej jednak uważam, że jest on znaczący, a jednorodny zakres tematyczny ośmiu publikacji cyklu habilitacyjnego oraz ich znaczenie (przynajmniej częściowo potwierdzone cytowaniami), pozwala na pozytywną ocenę osiągnięcia habilitacyjnego.

Biorąc dodatkowo pod uwagę aktywność konferencyjną habilitanta a także inne aspekty jego działalności naukowej oraz pewne doświadczenie dydaktyczne i popularyzatorskie uważam, że jest on dojrzałym badaczem, który będzie potrafił swoją wiedzę, warsztat obliczeniowy i doświadczenie wykorzystać do zdynamizowania swojej kariery naukowej. Wnoszę zatem o nadanie dr. Nevillowi Gonzalezowi Szwackiemu stopnia doktora habilitowanego nauk fizycznych.

Toruń, 6-08-2019

