

Prof. dr hab. inż. Artur Chrobak
Uniwersytet Śląski w Katowicach
Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych
Instytut Inżynierii Materiałowej

**Recenzja osiągnięcia naukowego oraz całokształtu dorobku zawodowego
przedstawionego do oceny w postępowaniu habilitacyjnym
dr Magdaleny Popielskiej (Birowskiej)
w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne.**

1. Podstawa opracowania recenzji.

Uchwała Rady Naukowej Dyscypliny Nauki Fizyczne na Uniwersytecie Warszawskim z dnia 11.03.2024 r. w sprawie powołania składu Komisji Habilitacyjnej w postępowaniu w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne dr Magdaleny Popielskiej. Recenzję opracowałem w oparciu o dokumentację osiągnięć Habilitantki przekazaną w formie elektronicznej. W ocenie osiągnięć dr Magdaleny Popielskiej kierowałem się wymaganiami określonymi w ustawie z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2020 r. poz. 85 z późniejszymi zmianami).



2. Charakterystyka Habilitantki.

Dr Magdalena Popielska ukończyła studia magisterskie na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego w 2008 roku. Zrealizowała dwie prace magisterskie w dyscyplinach nauk fizycznych (*“Zastosowanie metod LDA do obliczania stanów elektronowych w wybranych układach nanoskopowych”*) oraz nauk biologicznych (*“Zastosowanie wybranych metod fizycznych w badaniach czerwonych ciałek krwi”*). W 2014 roku Habilitantka obroniła pracę doktorską na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego w dyscyplinie nauk fizycznych zatytułowaną: *“Jednoosiowa magnetyczna anizotropia w rozcieńczonym półprzewodniku półmagnetycznym (Ga,Mn)As”*. Obecnie, dr Magdalena Popielska zatrudniona jest na stanowisku adiunkta badawczo-dydaktycznego na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego.

3. Ocena osiągnięć naukowych.

Jako główne osiągnięcie naukowe Habilitantka przedstawiła cykl publikacji o wspólnym tytule: *“Badanie właściwości fizycznych warstwowych materiałów typu van der Waalsa metodami ab initio”*. Na wskazany cykl publikacji składa się osiem publikacji w czasopismach o międzynarodowym zasięgu. W czterech z nich Habilitantka jest pierwszym autorem.

Zasadniczo, tematyka tych prac skupia się wokół badania właściwości fizycznych nowoczesnych nanoukładów warstwowych, w których występują stosunkowo słabe oddziaływania pomiędzy warstwami typu van der Waalsa. W szczególności są to grafen, czarny fosfor, heksagonalny azotek boru, dichalkogenki metali przejściowych (MX_2 , $M=Hf, Zr, Sn$; $X=S, Se$), trichalkogenki fosforu metali przejściowych (MPX_3 , $M=Mn, Ni$, $X=S, Se$) oraz bromek siarczku chromu ($CrSBr$). Przedmiotem analiz były wybrane właściwości indukowane naprężeniem, rodzajem podłoża, wymiarowością układu oraz porządkiem magnetycznym. Metodologia badań to przede wszystkim obliczenia i symulacje metodą funkcjonału gęstości (DFT), w pewnej części, weryfikowane badaniami o charakterze doświadczalnym. Moim zdaniem Habilitantka przedstawiła wartościowe osiągnięcie potwierdzone publikacjami w dobrych i bardzo dobrych czasopismach takich

jak *Physical Review B*, *Journal of Materials Chemistry C*, *Journal of Physical Chemistry C*, *Computational Materials Science*, *Nanomaterials*, *Nanotechnology* oraz *Physical Review Research*.

Szczególnie ważne, moim zdaniem, są następujące publikacje:

1. W pracy „*The impact of hexagonal boron nitride encapsulation on the structural and vibrational properties of few layer black phosphorus*” (H1) poruszono problem hermetyzacji czarnego fosforu poprzez zastosowanie warstw azotku boru. Czarny fosfor (BP) jest półprzewodnikiem wykazującym ciekawe właściwości elektryczne i optoelektryczne. Problemem jednak jest jego stabilność ograniczająca potencjalne zastosowania. Zaproponowano stabilizację struktury poprzez dodatkowe warstwy BN oraz zbadano wpływ tych warstw na właściwości strukturalne i wibracyjne warstwy BP. Wykazano, że oddziaływanie van der Waalsa pomiędzy warstwami powoduje istotne dwuosiowe odkształcenia struktury czarnego fosforu oraz przesunięciem ku czerwieni modu optycznego drgań sieci. Głównym osiągnięciem pracy jest wykazanie, że, w wybranym układzie, możliwe jest kontrolowanie właściwości poprzez oddziaływania z warstwami hermetyzującymi.

Praca ma charakter teoretyczny (obliczenia DFT), jednak uzyskane rezultaty są cenne dla naukowców zajmujących się fizyką i aplikacjami warstwowymi nanoukładów.

2. W pracy „*Assessment of approaches for dispersive forces employing semihydrogenated graphene as a case study*” (H3) przedstawiono wyniki symulacji (metodą DFT) energii adsorpcji atomów wodoru do warstwowej struktury grafenu w dwóch przypadkach: warstwy grafenu solo oraz warstwy grafenu na podłożu niklowym. Uwodornienie grafenu jest jednym ze sposobów zmiany jego struktury elektronowej w kierunku właściwości półprzewodnikowych. Układy takie wykazują również właściwości ferromagnetyczne, co stwarza możliwości wykorzystania tych materiałów w układach spintronicznych. Wykazano jakościowo i ilościowo istnienie minimów energii związanych z adsorpcją chemiczną i fizyczną wodoru oraz bariery pomiędzy nimi. Ciekawy wynik uzyskano dla układu z podłożem niklowym. Okazało się, że w tym przypadku istnieje tylko jedno minimum energetyczne związane z chemisorpcją. Ponadto, adsorpcja wodoru zmienia naturę wiązania pomiędzy warstwą grafenu i podłożem niklowym od słabego do silnego

wiązania półkwalencyjnego. Pewien niedosyt z lektury publikacji może powodować brak przedstawienia obliczeń struktury elektronowej analizowanych układów, niemniej jednak, przedstawione wyniki są wartościowe i poszerzają istniejący stan wiedzy.

3. W pracy „*Large exciton binding energies in MnPS₃ as a case study of a van der Waals layered magnet*” (H4) przeprowadzono bardzo ciekawe symulacje właściwości elektronowych związku MnPS₃ jako przedstawiciela warstwowych półprzewodników magnetycznych. Obliczenia wykonano dla monowarstwy oraz układu warstwowego złożonego z kilku monowarstw MnPS₃. Okazało się, że różne konfiguracje stanów magnetycznych mają wpływ na strukturę elektronową, masę efektywną elektronów i dziur. Szczególnie interesujące w opisywanej pracy są dane dotyczące wartości energii wiązania ekscytonowej pary elektron-dziura w układzie monowarstwy atomowej. Wykazano, że wartość tej energii wynosi nieco mniej niż 1 eV i jest znacznie większa niż w przypadku innych powszechnie stosowanych związków półprzewodnikowych. Ponadto, energia wiązania ekscytonu zależała od założonego porządku magnetycznego. Sumując, badany związek jest dobrym kandydatem do badań zjawisk magneto-elektro-optycznych i ich zastosowań. Moim zdaniem praca H4 zasługuje na wyróżnienie w analizie dorobku naukowego habilitantki.

4. Zagadnienia magnetyzmu w układach 2D poruszane są również w publikacji „*Limited Ferromagnetic Interactions in Monolayers of MPS₃ (M = Mn and Ni)*” (H6). Również i tu posłużono się metodą funkcjonału gęstości w celu określenia oddziaływań wymiennych pomiędzy atomami magnetycznymi z uwzględnieniem oddziaływań do trzeciego najbliższego sąsiada. Wykazano, że w przypadku monowarstwy MnPS₃ dominujące jest antyferromagnetyczne oddziaływanie wymienne pomiędzy najbliższymi sąsiadami. Ciekawy wynik otrzymano dla układu z niklem. W tym przypadku, pomimo ferromagnetycznego porządku pomiędzy najbliższym sąsiadem, dominujące jest oddziaływanie pomiędzy trzecim najbliższym sąsiadem o charakterze antyferromagnetycznym. Efekty te zostały wyjaśnione poprzez charakter wiązań oraz występowanie tzw. superwymiany. Przedstawione w pracy obliczenia niewątpliwie poszerzają fundamentalną wiedzę w dziedzinie natury magnetyzmu w układach 2D.

5. Na uwagę zasługuje również udział Habilitantki w pracy „*Optical markers of magnetic phase transition in CrSBr*” gdzie wykonując obliczenia DFT wyjaśniono naturę sprzężenia

magneto-optycznego w związku CrSBr. Zasadniczo, publikacja ma charakter eksperymentalny, jednak przedstawione tam rozważania teoretyczne stanowią jej istotny wkład. W pracy pokazano kreację pomiędzy różnymi zjawiskami optycznymi oraz stanem magnetycznym monokryształu CrSBr. Dobra zgodność określonej struktury elektronowej i przerwy energetycznej z obserwowanymi doświadczalnie przejściami optycznymi potwierdza poprawność zastosowanego modelu.

W każdej z przedstawionych do oceny publikacji (H1 – H8) znajdują elementy poszerzające stan wiedzy stanowiące istotny wkład naukowy Habilitantki w dziedzinie fizyki nanoukładów warstwowych. Za szczególnie istotne uważam badania podstawowe w zakresie magnetyzmu układów 2D.

4. Ocena aktywności naukowo-badawczej Habilitantki realizowanej w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury, w szczególności zagranicznej.

W okresie po uzyskaniu stopnia doktora Habilitantka odbyła cztery jedno i kilkutygodniowe staże w takich ośrodkach jak Uniwersytet W Regensburgu, Technische Universität (TU) Dresden, Departments of the Institute of Ion Beam Physics and Materials Research (Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf) oraz Institute of Semiconductor & Solid State Physics (Johannes Kepler Universität Linz, Austria).

Jak wskazano w autoreferacie, Habilitantka współpracuje z wieloma ośrodkami krajowymi i zagranicznymi takimi jak Politechnika Warszawska, Politechnika Wroclawska, Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk, Technion (Izrael), Uniwersytet w Regensburgu (Niemcy), Uniwersytet w Aachen (Niemcy), Uniwersytet w Arkansas UARK (USA). W wykazie publikacji nie trudno znaleźć współautorów z wymienionych wyżej ośrodków, co jest potwierdzeniem istotnej aktywności habilitantki w innych niż macierzysta jednostka. Przykłady takich publikacji to:

- Wet-chemical etching and delamination of MoAlB into Mo₂B₂MBene and its outstanding photocatalytic performance, Adv. Funct. Materials 33, (2023).



- Synthesis, properties and solid lubrication performance of MoAlB-based MBene, *Applied Mat. Today* 35, 101925 (2023),
- Anisotropic Magnetodielectric Coupling in Layered Antiferromagnetic FePS₃, *Phys. Rev. B* 108, L060403 (2023)

Na uwagę zasługuje również fakt współpracy w ramach projektów badawczych (cztery granty Narodowego Centrum Badań), w których w dwóch (OPUS 18, SONATA 12) Habilitantka pełni rolę kierownika (PI).

Stwierdzam, że aktywność naukowo-badawcza Habilitantki jest adekwatna do ubiegania się o stopień doktora habilitowanego.

5. Ocena pozostałych osiągnięć naukowych, dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę lub sztukę.

Jak przedstawiono w dokumentacji, Habilitantka jest współautorem 32 publikacji (26 po uzyskaniu stopnia doktora), w tym znajduje się jedna praca monoautorska (M. Birowska, *Influence of the different strains' components on the uniaxial magnetic anisotropy parameters for a (Ga,Mn)As bulk system: A first-principles study*, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 432, 396-403 (2017)).

Parametry bibliometryczne Habilitantki są na wysokim poziomie (baza SCOPUS 05.2024) i przedstawiają się następująco:

- Ilość publikacji - 38
- Indeks Hirsha – 13
- Suma cytowań – 631
- Suma Cytowań bez autocytowań – 467
- Średnia liczba cytowań na pracę – 12

Mocną stroną aktywności naukowej Habilitantki jest jej udział w licznych konferencjach i seminariach. W dokumentacji można znaleźć informacje o 14 wystąpieniach ustnych, 3 zaproszonych wykładach oraz 4 wykładach seminaryjnych.

Do osiągnięć naukowych należy również zaliczyć udział w realizacji projektów przyznawanych na drodze konkursów. W wykazie osiągnięć naukowych wymieniono

dziesięć projektów, z czego w trzech Pani dr Popielska pełni lub pełniła funkcję kierownika.

W swoim dorobku Habilitantka posiada osiągnięcia i) dydaktyczne (prowadzenie wykładów w języku polskim i angielskim, promotorstwo 3 prac licencjackich, 3 magisterskich, 3 doktorskich – promotor pomocniczy), popularyzatorskie (wykłady i ćwiczenia) oraz organizacyjne (sekretarz w komisjach wydziałowych).

Sylwetkę naukową dopełniają liczne recenzje w renomowanych czasopismach, stypendia i nagrody oraz stworzenie zespołu badawczego wokół tematyki układów warstwowych.

Stwierdzam, że pozostałe osiągnięcia Habilitantki (naukowe, organizacyjne i popularyzatorskie) spełniają wymagania stawiane przed osobami starającymi się o nadanie stopnia doktora habilitowanego.

6. Podsumowanie.

- Działalność naukowa dr Magdaleny Popielskiej (Birowskiej) dotyczy zagadnień z dyscypliny nauk fizycznych. Wśród wskazanych do oceny osiągnięć naukowych, będących podstawą ubiegania się o nadanie stopnia doktora habilitowanego, znajduje się cykl ośmiu powiązanych tematycznie artykułów naukowych. Zawarte w opiniowanym cyklu wyniki wieloletnich badań dokumentują uzyskanie przez Habilitantkę zarówno osiągnięcia o charakterze poznawczym, jak i metodologicznym. Za szczególnie istotne uważam badania podstawowe w zakresie magnetyzmu układów 2D.
- Wskazane osiągnięcia naukowe dr Magdaleny Popielskiej (Birowskiej) stanowią znaczący wkład w rozwój dyscypliny nauk fizycznych.
- Kandydatka wykazuje się także aktywnością naukową realizowaną w więcej niż jednej krajowej instytucji naukowej oraz posiada udokumentowany dorobek w zakresie pozostałych osiągnięć naukowych, działalności dydaktycznej, organizacyjnej oraz popularyzatorskiej.

Stwierdzam zatem, że dr Magdalena Popielska spełnia wymagania ustawowe stawiane osobom ubiegającym się o nadanie stopnia doktora habilitowanego w dyscyplinie nauk fizycznych.

12.05.2024

Chbdr Aul