

Dr hab. Małgorzata Samsel-Czekała, prof. INTiBS PAN

Oddział Teorii Materii Skondensowanej,

tel.: +48 71 3954 322

e-mail: m.samsel@intibs.pl

Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych
im. Włodzimierza Trzebiatowskiego Polskiej Akademii Nauk
ul. Okólna 2, 50-422 Wrocław

Pozytywna recenzja osiągnięć naukowych Pani dr Magdaleny Popielskiej (zd. Birowskiej) ubiegającej się o stopień dr. habilitowanego w dyscyplinie nauki fizyczne na podstawie cyklu publikacji pt.: "*Badanie właściwości fizycznych warstwowych materiałów typu van der Waalsa metodami ab initio*"

Wstęp – sylwetka naukowa Habilitantki

Pani dr Magdalena Popielska (z d. Birowska - publikująca pod tym nazwiskiem) ur. w 1984 r. w Cieszynie, uzyskała w 2008 r. na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego (UJ) dyplomy: magistra fizyki (z wyróżnieniem) za pracę magisterską pt.: *Zastosowanie metod LDA do obliczania stanów elektronowych w wybranych układach nanoskopowych*, przygotowaną pod kierunkiem wybitnego teoretyka Prof. Józefa Spałka, a także magistra biofizyki na podstawie pracy magisterskiej pt.: *Zastosowanie wybranych metod fizycznych w badaniach czerwonych ciałek krwi*, wykonanej pod kierunkiem Dr. hab. Kvetoslavy Burdy. Następnie w 2014 r. dr Popielska zdobyła stopień doktora nauk fizycznych w Instytucie Fizyki Teoretycznej, na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego (UW) po obronie rozprawy doktorskiej pt.: *Jednoosiowa magnetyczna anizotropia w rozcieńczonym półprzewodniku półmagnetycznym (Ga,Mn)As*, której Promotorem był Prof. Jacek A. Majewski, tym samym spełnia podstawowy warunek posiadania stopnia doktora, określony w obowiązującej Ustawie oraz Uchwale 157 Senatu UW.

W latach 2014 - 2017 Habilitantka była zatrudniona na stanowisku adiunkta naukowego na Wydziale Fizyki UW jako postdoc w ramach projektu Harmonia V, Narodowego Centrum Nauki (NCN), pt.: *Modelowanie struktur grafenowych sprzężonych z metalami i izolatorami w grupie Prof. Jacka Majewskiego*. Zatrudnienie to zostało przedłużone o pół roku z powodu urlopu macierzyńskiego. Następnie w latach 2017 – 2021 była zatrudniona na tym samym wydziale UW na stanowisku adiunkta naukowego jako kierownik grantu SONATA 12 (NCN) pt.: *Teoretyczne badania właściwości strukturalnych, elektronicznych, magnetycznych i optycznych heterostruktur van der Waalsa zawierających dwuwymiarowe materiały warstwowe*, przy czym Projekt ten został także

przedłużony o pół roku z powodu urlopu macierzyńskiego. Obecnie od 2020 r. Habilitantka pracuje także na stanowisku adiunkta badawczo-dydaktycznego.

Recenzja osiągnięć Habilitantki została sporządzona na podstawie dokumentacji otrzymanej w postaci elektronicznej w wersji polskiej i angielskiej, a także informacji dostępnych w internetowych bazach naukowych.

Ocena osiągnięcia naukowego - cyklu 8 publikacji

Pan dr Magdalena Popielska po doktoracie w 2014 r., pracując na stanowisku adiunkta naukowego, prowadziła badania teoretyczne z użyciem metod DFT w ramach ww. projektów NCN: Harmonia V (jako postdoc) oraz SONATA 12 (jako Kierownik projektu) i zbudowała własny zespół naukowy. Wyniki powyższych badań przyczyniły się do powstania Jej osiągnięcia naukowego, stanowiącego podstawę do ubiegania się o stopień doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne. Jest nim cykl 8 publikacji współautorstwa dr Popielskiej [H1-H8] pt.: „*Badanie właściwości fizycznych warstwowych materiałów typu van der Waalsa metodami ab initio.*”, który uznaję za spójny tematycznie, pomimo różnorodności badanych grup materiałów, co podnosi jego wartość. Obszerne artykuły wchodzące w skład ocenianego cyklu obejmują wartościowe wyniki czysto teoretyczne otrzymane z zasad pierwszych z użyciem zaawansowanych, standardowych metod teorii funkcjonału gęstości (DFT) oraz własnych metod modelowania superkomórek, które w dużej mierze zostały skonfrontowane z wynikami eksperymentalnymi z dostępnymi w literaturze albo własnymi, uzyskanymi przez współpracowników.

Opublikowane zostały one w okresie pięciu ostatnich lat 2019-2023 (a więc kilka lat po obronie doktoratu) w międzynarodowych recenzowanych czasopismach, z tzw. bazy Journal Citation Reports (JCR), dostępnych w bazie naukowej Web of Science (WoS), które charakteryzują się wysokimi współczynnikami wpływu tzw. *impact factor* (IF). Należą do nich wiodące czasopisma z fizyki oraz z pogranicza fizykochemii ciała stałego oraz inżynierii materiałowej, takie jak Physical Review B, Physical Review Research, Journal of Physical Chemistry C, Journal of Materials Chemistry C, AIP Advances, Nanotechnology, Nanomaterials, Computational Materials Science. Średni IF na publikację wynosi ok. 4,4, a sumaryczny IF ~ 35,3, co stanowi bardzo dobry wynik. Podobnie wysoka jest średnia i sumaryczna liczba punktów MNIŚW, która wynosi odpowiedni 103,75 i 810.

Natomiast sumaryczna liczba cytowań tych 8 publikacji wg bazy WoS była równa 79 (obecnie 125), w tym najczęściej cytowane w ciągu 2-3 lat są publikacje w Physical Review B [H4] (23 – obecnie 28), w J. Phys. Chem. C [H6] (16 – obecnie 30 razy) oraz w Physical Review Research [H7] (13 – obecnie 28 razy). Tak więc na jedną publikację przypada średnio aż 9,9 (obecnie 15,6) cytowań, co można uznać za znaczący wynik, zważywszy że oceniany cykl powstał w ostatnich 5 latach, a więc został zauważony jako istotny w dyskusji na forum międzynarodowym. To dobrze świadczy

m.in. o aktualności podjętej tematyki oraz wysokiej jakości merytorycznej publikacji z cyklu habilitacyjnego.

Publikacje H1-H8 powstały w zespołach 2-9 współautorów (średnio 6) z kraju i zagranicy. Należy podkreślić, że Habilitantka w 3 pracach jest pierwszą a w 2 - ostatnią współautorką, a zarazem autorką do korespondencji, co świadczy o jej wiodącej roli w ww. publikacjach, którą potwierdzają dołączone oświadczenia współautorów, a także umiejętności formułowania oraz rozwiązywania problemów naukowych z wykorzystaniem umiejętnie dobranych metod obliczeniowych z zasad pierwszych, tworzenia praktycznych procedur wyznaczenia optymalnych superkomórek dla wybranych układów, a także kompleksowej interpretacji dostępnych własnych lub literaturowych wyników doświadczalnych.

Przedmiotem badań w ramach wybranego cyklu prac H1-H8 były różnorodne układy materiałów warstwowych, obejmujące grafen, czarny fosfor (BP), heksagonalny azotek boru (hBN), dichalkogenki metali przejściowych (TMDs) typu MX_2 ($M= Mn, Ni; X= S, Se$), trichalkogenki fosforu metali przejściowych typu MPX_3 ($M= Mn, Ni; X= S, Se$) oraz CrSBr. Powyższe materiały warstwowe typu van der Waalsa (vdW) badane były pod względem właściwości strukturalnych, elektronowych, optycznych czy magnetycznych, w szczególności pod kątem zmian właściwości fizycznych pod wpływem naprężenia, modyfikacji podłoża czy wymiarowości układu, a także domieszkowania, jak również indukowanych porządkiem magnetycznym.

Motywacją do podjęcia tych badań jest możliwość wykorzystania materiałów typu vdW w inżynierii materiałowej ze względu na ich wysoką podatność na oderwanie w nich sąsiednich cienkich warstw wzajemnie od siebie lub od podłoża bądź też przyłączanie do innych heterostruktur, a także funkcjonalizację chemiczną oraz wykazywanie doskonałych właściwości mechanicznych czy elastycznych oraz elektronowych. Łatwość modulowania właściwości takich materiałów warstwowych sprawia, że są obiecującymi materiałami funkcjonalnymi do wykorzystania w przemyśle elektronicznym, w szczególności jego nowoczesnych gałęziach: optoelektronice, spintronice, straintronice, topotronice, czy też jako nowoczesne czujniki lub materiały do magazynowania energii. Tematyka ta zainicjowana uzyskaniem po raz pierwszy monowarstw grafenu jest aktualnie intensywnie rozwijana z poszerzeniem o inne układy dwuwymiarowe (2D), w szczególności typu vdW, wzbudzając nadal bardzo duże zainteresowanie.

Pan dr Magdalena Popielska profesjonalnie modelowała, w szczególności z użyciem procedury opracowanej przez nią i jej magistranta Tomasza Necio (praca [H2]) w postaci darmowego oprogramowania w Pythonie, optymalne (o małym rozmiarze i słabych nieprężeniach warstw z uwzględnieniem kątów skręcenia) superkomórki dla heterostruktur vdW, zbudowanych z dwóch lub więcej kryształów 2D. Wykonała lub nadzorowała m.in. dla nich obliczenia struktury pasmowej elektronów metodami pseudopotencjału w bazie fal płaskich (PAW) w ramach teorii funkcjonału

gęstości (DFT), używając standardowych pakietów oprogramowania - głównie VASP. Natomiast do parametryzacji funkcjonału korelacyjno-wymiennego dobierała umiejętnie najodpowiedniejsze w danym przypadku przybliżenia: lokalnej gęstości (LDA oraz mBJ-LDA) lub uogólnionych gradientów (GGA typu PBE) bez lub z uwzględnieniem poprawki typu U-Hubbarda, która uwzględnia silniejsze korelacje elektronowe (DFT+U: LDA+U, GGA+U), a także przybliżenia hybrydowe. Na szczególną uwagę zasługują ponadto uwzględnione dla warstw przybliżenia dalekozasięgowych elektrostatycznych oddziaływań dyspersyjnych typu vdW pomiędzy dipolami indukowanymi w efekcie chwilowych zmiennych rozkładów ładunków elektrycznych. Habilitantka użyła w tym celu prostej poprawki do całkowitej energii w podejściu Grimme'a (DFT-D) bądź też dokładniejszego przybliżenia części nielokalnej potencjału korelacyjno-wymiennego (vdW-DF). Natomiast dla układów z istotnym oddziaływaniem spinowo-orbitalnym, uwzględniła je na poziomie pseudopotencjałów oraz z użyciem formalizmu niekolinearnego magnetyzmu. Dla wybranych układów Habilitantka wyznaczyła dodatkowo widma częstości fononowych oraz intensywności Ramana, w oparciu o perturbacyjną teorię funkcjonału gęstości (DFPT). Obliczenia zostały wykonane na superkomputerach w ICM, UW w Warszawie, Cyfronocie w Krakowie, w ramach programu PL-Grid Polska Infrastruktura Wspomagania Obliczeń w Europejskiej Przestrzeni Badawczej.

Dla wybranych właściwości fizycznych, takich jak energie wiązań ekscytonów czy magnetyzm, zostały użyte dodatkowo efektywne modele (oparte na równaniu Bethe-Salpera czy modelu Hubbarda) z użyciem parametrów uzyskanych z obliczeń DFT.

Wyniki ww. obliczeń zostały porównane z wynikami eksperymentalnymi, w szczególności pomiarów spektroskopii i dyfrakcji rentgenowskiej, pomiarów widm optycznych, absorpcji fotoluminescencji, Ramana, fotoakustycznych, a także pomiarów liniowych współczynników ciśnienia jak również magnetyzacji z użyciem PPMS.

Habilitantka ze swoim zespołem otrzymała wiele bardzo wartościowych i oryginalnych wyników, z których najważniejsze wg mnie wymieniam poniżej.

W publikacji [H4] przewidziano po raz pierwszy ogromne wartości energii wiązań ekscytonów z krawędzi pasm, powyżej 1 eV, dla monowarstwy MnPS₃ w próżni, które znacznie przekraczają wartości energii wiązań ekscytonów typowych dla intensywnie badanej klasy materiałów TMDs.

W pracy [H6] wykazano, że krysztaly warstwowe MPX₃ mogą być również domieszkowane jonami metali przejściowych. W obliczeniach DFT+U, połączonych ze sparametryzowanymi obliczeniami w ramach modelu ciasnego wiązania, uwzględniono różne typy domieszek magnetycznych oraz rozważono mieszane całki wymiany (domieszka-gospodarz) pomiędzy różnymi atomami magnetycznymi dla najbliższych sąsiadów dla ustalonej koncentracji domieszek dla stopów (M_{3/4}X_{1/4})PS₃, gdzie M= Mn, Ni i X= Mn, Ni, Cr. Dzięki temu wykazano, że w przypadku stopów (w przeciwieństwie do związków macierzystych) mieszane całki wymiany dla pierwszych i trzecich

sąsiadów są tego samego rzędu wielkości, co może prowadzić do konkurencji różnych porządków antyferromagnetycznych, a w efekcie tłumaczyć niższą, obserwowaną temperaturę Néela dla stopów. Ponadto wykazano, że domieszki Mn i Ni mają tendencję do klastrowania, tymczasem jony Cr preferują losowe rozmieszczenie w sieci gospodarza. Rozważane stopy sklasyfikowano jako izolatory Motta, które ogólnie wykazują węższe przerwy pasmowe niż związki macierzyste. Wykazano także, iż materiały MPX_3 przejawiają silny antyferromagnetyzm. Jednakże przy zadaniu szczególnego rozmieszczenia domieszek magnetycznych w $NiPS_3$ można indukować fazę ferrimagnetyczną.

W publikacji [H7] zbadano wpływ domieszkowania z podstawieniem atomów niemagnetycznych (chalkogenów) w układach warstwowych $MnPS_{3-x}Se_x$ i $NiPS_{3-x}Se_x$ i wykazano różny charakter trendu ewolucji temperatury Néela wraz ze zmianą koncentracji x w materiałach zawierających Mn i Ni (silniejszy trend dla drugiego układu z Ni), co związane jest z większymi wartościami całek wymiany J dla układów zawierających Ni. Co ważne, pokazano, że podstawienie chalkogenkowe jest dobrą metodą kontrolowania anizotropii magnetycznej w materiałach warstwowych (efektywne orientowanie osi łatwej magnetyzacji i kontrola przejścia typu spin-flop (SF)). Takiego rodzaju przestrajalny magnetyzm, ujawniony przez podstawienie niemagnetyczne, okazuje się być praktyczną metodą inżynierii dla struktur o niskowymiarowym magnetyzmie.

W pracy [H8] zbadano w sposób kompleksowy wpływ pozapłaszczyznowego uporządkowania magnetycznego na właściwości strukturalne, elektronowe i drgania sieci kryształu warstwowego $CrSBr$ i wykazano, że pozapłaszczyznowy porządek magnetyczny ma silny wpływ na strukturę elektronową dla linii wysokiej symetrii $\Gamma-Z$, m.in. powodując rozszczepienie pasm przewodnictwa dla uporządkowania ferromagnetycznego spinów w sąsiednich warstwach bądź też charakteru przerwy pasmowej. Co ciekawe, zidentyfikowano również optycznie aktywne mody Ramanowskie, wrażliwe na międzywarstwowe uporządkowanie magnetyczne. Oznacza to, że drgania sieci B_{2g} i B_{3g} mogą stanowić markery rodzaju pozapłaszczyznowego porządku magnetycznego, których różnice wykazały dobrą korelację z odpowiednimi wartościami eksperymentalnymi, uzyskanymi z pomiarów widm Ramana.

Na duże uznanie zasługuje wysoki stopień zaawansowania obliczeń *ab initio* zastosowanych dla ww. złożonych układów warstwowych, a także jasna prezentacja w publikacjach z cyklu habilitacyjnego otrzymanych wyników obliczeń teoretycznych, w tym ich pogłębiona analiza i dyskusja w konfrontacji z dostępnymi w literaturze oraz uzyskanymi przez współpracowników wynikami eksperymentalnymi. Publikacje te reprezentują wysoki styl typowy dla prestiżowych międzynarodowych czasopism fizycznych i fizykochemicznych.

Podsumowując tę część recenzji, w mojej ocenie cykl 8. publikacji zgłoszonych przez Panią dr Magdalenę Popielską jako osiągnięcie naukowe wnosi istotny, bardzo wartościowy i nowatorski wkład w rozwój dyscypliny nauki fizyczne dzięki przeprowadzeniu przez nią badań

fizykochemicznych, opartych na modelowaniu z użyciem metod z zasad pierwszych, opartych na teorii funkcyjności gęstości, wybranych materiałów warstwowych typu van der Waalsa, które mają duży potencjał aplikacyjny. Przy tym Habilitantka wykazała się również samodzielnością w formułowaniu problemów badawczych oraz w ich systematycznym rozwiązywaniu w kolejnych pracach cyklu, a także obszerną wiedzą teoretyczno-eksperymentalną nt. właściwości fizykochemicznych badanych układów w szerszym kontekście. Zatem Pani dr Magdalena Popielska w zupełności spełnia drugi warunek stawiany habilitantom, określony w Ustawie oraz Uchwale 157 Senatu UW (§ 4 ust. 1 pkt 2).

Ocena aktywności naukowej realizowanej w więcej niż jednej uczelni lub instytucji naukowej

Habilitantka, związana była głównie z uczelniami UW oraz UJ. Zbudowała swój własny teoretyczny zespół badawczy na UW w ramach projektów NCN SONATA 12, którym kierowała, oraz OPUS 18, jako koordynator w międzynarodowym konsorcjum. Opiekowała się m.in. 3. doktorantami, 3. magistrantami, 3. licencjatami, a także postdocami oraz innymi wykonawcami w projektach. Wykazała się szeroką współpracą naukową z wieloma ośrodkami naukowo-badawczymi krajowymi i zagranicznymi, w teoretycznymi i eksperymentalnymi, które zaowocowały m.in. ww. cyklem 8 publikacji habilitacyjnych jak również innymi różnorodnymi publikacjami, w tym 6. przed uzyskaniem stopnia doktora oraz 17. po uzyskaniu stopnia doktora, sumarycznie 31 publikacjami w czasopiśmie o zasięgu międzynarodowym z listy JCR. Prezentowała także swoje wyniki na licznych konferencjach naukowych w kraju i zagranicą. Ponadto Pani dr Magdalena Popielska w ramach współpracy odbyła 4 krótkie staże zagraniczne w 3. znanych ośrodkach naukowych w Niemczech oraz 1 w Austrii. Należy zauważyć jednak brak dłuższego stażu zagranicznego, co nie wpłynęło jednak na wysoką jakość badań naukowych, prowadzonych przez Habilitantkę we współpracy krajowej i zagranicznej. Wykazała się także działalnością recenzencką publikacji oraz prac dyplomowych, a także bogatą działalnością dydaktyczną.

Podsumowując tę część recenzji, uznaję, że Habilitantka wykazała się istotną aktywnością naukową realizowaną w więcej niż w więcej niż jednej uczelni lub instytucji naukowej, w szczególności zauważoną przez środowisko międzynarodowe. W związku z powyższym spełnia wymogi określone w Ustawie oraz Uchwale 157 Senatu UW (§ 4 ust. 1 pkt 3).

Podsumowanie

W podsumowaniu całej recenzji jednoznacznie pozytywnie oceniam osiągnięcie naukowe Pani dr Magdaleny Popielskiej w formie spójnego cyklu 8 publikacji, w których Habilitantka wniosła znaczący i oryginalny wkład w rozwój dyscypliny nauki fizyczne dzięki zrealizowanym badaniom różnorodnych nowoczesnych materiałów warstwowych z oddziaływaniami typu

van der Waalsa z użyciem zaawansowanych metod *ab initio*, opartych na teorii funkcjonału gęstości. Publikacje te dokumentują bardzo dobre umiejętności Habilitantki modelowania i analizy ww. układów metodami obliczeń z zasad pierwszych, a także obszerną ogólną wiedzę, związaną z tematyką badań z pogranicza fizykochemii ciała stałego oraz inżynierii materiałowej, a także dużą samodzielność w formułowaniu i rozwiązywaniu problemów i umiejętność współpracy i kierowania zespołami badawczymi. Pani dr Magdalena Popielska wykazała się ponadto (mimo braku dłuższych staży zagranicznych) wystarczająco istotną aktywnością naukową realizowaną w więcej niż jednej uczelni lub instytucji naukowej, docenioną również na arenie międzynarodowej.

Tym samym Habilitantka spełnia wszystkie wymagania stawiane habilitantom na mocy obowiązujących przepisów prawnych, określonych w Ustawie oraz Uchwale 157 Senatu UW (w szczególności § 4 ust. 1 pkt 2 oraz 3).

Zatem wnoszę o dopuszczenie Pani dr Magdaleny Popielskiej do dalszych etapów postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne.

