



**POLITECHNIKA
GDAŃSKA**

WYDZIAŁ CHEMICZNY

Prof. dr hab. inż. Jarosław Chojnacki,
Katedra Chemii Nieorganicznej,
Wydział Chemiczny PG

Gdańsk, 27.05.2025 r.

Ocena osiągnięcia naukowego p.t. „Rozmiarowe przemiany fazowe. Badania rentgenowskie i klasyfikacja” oraz aktywności naukowej i całokształtu dorobku

dr. Pawła E. Tomaszewskiego

*z Instytutu Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych Polskiej Akademii Nauk we Wrocławiu,
zgłoszonego w ramach postępowania habilitacyjnego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych,
w dyscyplinie nauki fizyczne*

Wstęp i ocena formalna

W związku powołaniem przez Radę Naukową INTiBS PAN w dniu 28 marca 2025 komisji habilitacyjnej dla dr. Pawła E. Tomaszewskiego i powierzeniem mi w tej komisji roli recenzenta, stwierdzam że otrzymałem do oceny komplet wymaganych dokumentów, w tym monografię naukową, zgodną z Ustawą „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce” z dnia 20 lipca 2018 r. Paweł Edward Tomaszewski swoją ścieżkę naukową rozpoczął od studiów magisterskich na Uniwersytecie Wrocławskim, a następnie obronił pracę doktorską pod tytułem „Rozszerzalność termiczna a strukturalne przemiany fazowe kryształów LiCsSO_4 , LiNH_4SO_4 i LiKSO_4 ” w roku 1984 w Instytucie Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN. Promotorem był prof. Kazimierz Łukasiewicz. Już od 1976 Habilitant był zatrudniony w w/wym Instytucie początkowo jako technik, awansując później na stanowisko asystenta i adiunkta. Od szeregu lat zajmuje się badaniami struktury kryształów bazującymi na dyfrakcji promieni X (również gamma). Szczególną wagę przypisuje do strukturalnych przemian fazowych w fazie krystalicznej zachodzących pod wpływem bodźców zewnętrznych jak temperatura (od pokojowej do ok. 4K), ciśnienie (sięgające ~50 GPa) a przede wszystkim interesuje się znaczeniem rozmiaru kryształitów. Badając zależne od rozmiaru przejścia fazowe, określane w literaturze jako „size effect” czy „size-induced phase transitions”, torował drogę do lepszego zrozumienia fizyki nanokryształitów, tak istotnego we współczesnej nanotechnologii. Odbył kilka staży zagranicznych na francuskich uniwersytetach: Uniwersytecie Naukowo-Medycznym w Grenoble, Uniwersytecie Paris-Nord w Paryżu-Villetaneuse, CNRS, LPCM w Meudon-Billeve koło Paryża oraz Centrum Badań jądrowych Orsay k. Paryża (badania neutronograficzne), oraz brał udział w międzynarodowych szkoleniach w Tel Aviwie (Izrael) i Erice (Włochy, Sycylia). Sporo czasu i wysiłku Habilitant poświęcił na poznanie historii życia i badań Jana Czochralskiego, co wiązało się z odwiedzeniem rodziny w Stanach Zjednoczonych, napisaniem kilku książek biograficznych o tej postaci i powstaniem audycji radiowych oraz filmów dokumentalnych na temat Czochralskiego.

Celem tej recenzji jest ocena osiągnięć naukowych, które powinny stanowić znaczny wkład w rozwój określonej dyscypliny naukowej. W tym przypadku jako osiągnięcie podano publikację monografii naukowej (ust. 1 punkt 2, Art. 219 Ustawy).

Przedmiotem dodatkowej analizy są również inne dokonania, np. dorobek dydaktyczny i popularyzatorski. Oceniono też wykazywanie przez Habilitanta istotnej aktywności naukowej oraz współpracę międzynarodową. Poniżej opisałem szczegółowo stopień spełniania wymienionych kryteriów przez dr. Pawła Tomaszewskiego.

Ocena osiągnięcia naukowego

Doktor Paweł E. Tomaszewski jako swoje osiągnięcie podaje monografię pt. „Rozmiarowe przemiany fazowe. Badania rentgenowskie i klasyfikacja.” wydaną przez Oficynę Wydawniczą Atut (Wrocławskie Wydawnictwo Naukowe). Wydawca ten znajduje się w wykazie wydawnictw publikujących recenzowane monografie naukowe w Komunikacie Ministra Edukacji i Nauki z dnia 22 lipca 2021, który przypisuje mu poziom I – 80 punktów ministerialnych (Pozycja 380, Unikatowy Identyfikator Wydawnictwa 45000). Dodatkowo Paweł E Tomaszewski ma na swoim koncie szereg publikacji naukowych (baza Scopus podaje indeks Hirscha = 22), utworzenie bazy przejść fazowych dbPT oraz znaczące osiągnięcia w zakresie popularyzacji historii nauki.

Przejdźmy do opisu i szczegółowej oceny osiągnięcia naukowego.

Rozprawa habilitacyjna zatytułowana „Rozmiarowe przemiany fazowe. Badania rentgenowskie i klasyfikacja” na 347 stronach opisuje rozmaite aspekty problemów pojawiających się w badaniach strukturalnych nanokryształów. Zasadniczymi celami monografii było: pokazanie specyfiki i niuansów wyznaczenia tzw. „wielkości kryształitów” w nanokryształach, klasyfikacja oraz opis rozmiarowych przejść fazowych oraz stworzenie dla nich aktualnej bazy danych. Praca składa się z ośmiu rozdziałów zatytułowanych: 1. Terminologia, zakres prac badawczych, 2. Podstawy fizyczne i aspekty metodologiczne dyfrakcyjnego badania monokryształów, 3. Metody szacowania wielkości kryształitów, 4. Rozmiarowe przemiany fazowe – pojęcie i klasyfikacja, 5. Baza danych, 6. Diagram wyspowy, 7. Przemiany pod ciśnieniem, 8. Badania własne; po których następuje Bibliografia (386 pozycji, w porządku alfabetycznym wg nazwisk autorów) oraz podsumowania - po polsku i po angielsku. Bibliografia zawiera 18 odnośników do własnych prac Habilitanta, z czego 16 jest jednoautorskich. Świadczy to bardzo wyraźnie o dużym zaangażowaniu osobistym oraz samodzielnym wkładzie Habilitanta w rozwijanie omawianej w monografii tematyki.

Habilitant pod koniec Wstępu pracy habilitacyjnej wymienia cztery najważniejsze ustalenia (tezy) i cele stanowiące treść jego pracy: 1. Nie da się dobrze zmierzyć wielkości nanokryształitów, 2. Zamiast diagramu Felchego należy stosować „diagram wyspowy”, 3. Model „rdzeń-powłoka” nanokryształu jest błędny 4. Opracowanie klasyfikacji typów rozmiarowych przemian fazowych i utworzenie dla nich bazy danych.

Autor bardzo skrupulatnie opisuje problemy związane z terminem „średnia wielkość kryształitów”. Należy zgodzić się z autorem, że za pomocą jednej liczby nie można dobrze opisać wielkiego zbioru nanokryształów, które nie tylko mają jakiś rozrzut statystyczny wielkości ale również mogą mieć różne kształty ziaren. Samo pojęcie średniego rozmiaru dla pojedynczego ziarna o kształcie niesferycznym może być rozmaicie definiowane (znanych jest około kilkunastu propozycji). W rozdziale drugim autor zwraca również uwagę na to, że mikroskopowe (np. TEM) obserwacje ziaren nanokryształów z wielu powodów nie muszą być zbieżne z rozmiarem kryształitów wyznaczanym w badaniach rentgenowskich. Między innymi w dyfrakcji nie obserwujemy części amorficznej a ponadto

jako rozmiar wyznaczana jest (ważona objętościowo) średnia długość kolumn prostopadłych do płaszczyzny odbijającej, a w mikroskopii uzyskujemy średnią ważoną powierzchniowo. Ponieważ zwykle informacja o średnim rozmiarze krystalitu w dyfrakcji uzyskiwana jest poprzez analizę profilu refleksu (w uproszczeniu: jego poszerzenia), autor krytycznie omawia najpierw źródła takiego poszerzenia, a potem opisuje metody matematyczne umożliwiające analizę dyfraktogramów (pojedynczego refleksu lub wszystkich refleksów). Monografia opisuje sposoby wyodrębniania poszerzenia aparaturowego (na podstawie wzorca lub obliczeń teoretycznych) i poszerzenia pochodzącego od próbki. To ostatnie z kolei należy dodatkowo rozdzielić na rozmiarowe i deformacyjne. Poszerzenie deformacyjne opisuje zależność Taylora, $\beta_d = 4\varepsilon \lg(\theta)$, gdzie ε średnie ważne odkształcenie sieciowe $\Delta d/d$, umożliwiającą separację poszerzenia deformacyjnego od rozmiarowego ze względu na inną zależność od kąta dyfrakcji 2θ . Do wyznaczenia wielkości krystalitów potrzebne jest tylko poszerzenie rozmiarowe. Niestety, wyodrębnienie poszerzenia rozmiarowego może być wykonane na wiele sposobów. Praca habilitacyjna Pawła Tomaszewskiego zawiera opis dziesięciu metod szacowania wielkości krystalitów bazujących na założonych kształtach profili (Rozdział 3.1), siedmiu metod wariancyjnych (Rozdział 3.2), czteremastu metod fourierowskich (Rozdział 3.3), czterech metod bazujących na dopasowaniu funkcji (Rozdział 3.4), siedmiu metod mieszanych (Rozdział 3.5) oraz trzynastu metod pełnozakresowych (Rozdział 3.6). Pod koniec rozdziału trzeciego znajdziemy również porównanie tych metod i podsumowanie. Rozdział ten stanowi więc kompendium wiedzy o współcześnie stosowanych metodach (autor wymienia ich w sumie aż 56) wyznaczania wielkości krystalitów w nanokryształach przy różnych założeniach początkowych i różnej metodologii. Już sama liczba możliwych do zastosowania procedur oznacza, że z tych samych danych pomiarowych można uzyskać wiele różnych wyników. Co gorsze, rozróżnienie między nimi może okazać się bardzo znaczny i istotny, a wskazanie najlepszej metody też nie jest możliwe. Dodając do tego fakt, że jako poszerzenie refleksu można przyjąć albo FWHM czyli szerokość profilu w połowie wysokości albo szerokość całkową (pole powierzchni pod krzywą, podzielone przez wysokość maksimum, Rys 11) albo (co jest rzadziej spotykane) wariancję, sytuacja zaczyna wyglądać bardzo niejednoznacznie.

Autor, biorąc pod uwagę tę swobodę w interpretacji danych pomiarowych stwierdza wprost, że nie da się dobrze zmierzyć wielkości krystalitu (str. 12, 14, 44 i dalej w wielu miejscach). Wartości podawane w publikacjach można interpretować jedynie jako orientacyjne. Jest to realizacja pierwszej tezy monografii.

Tak więc, przeczytawszy rozdział trzeci, po dwustu stronach lektury, czytelnik jest przygotowany do właściwej interpretacji parametru określanego jako rozmiar czy wielkość krystalitu. W rozdziale czwartym Habilitant przedstawia konstrukcję diagramów fazowych w przemianach rozmiarowych w układzie współrzędnych rozmiar- temperatura lub rozmiar – ciśnienie.

Tabelki stanowiące właściwą bazę danych rozmiarowych przejść fazowych umieszczone są w Rozdziale 5 w Tabeli 8. (16 stron z zakresu 219 – 235). Baza obejmuje 563 przejścia fazowe zachodzące w 398 krystalitach (w tym są 4 związki organiczne). Podaje ona dla każdego przejścia fazowego: grupy przestrzenne obu faz, typ przejścia fazowego, charakterystyczny rozmiar, odpowiednik rozmiaru w postaci temperatury wygrzewania oraz odnośnik literaturowy. Układ ten umożliwia zainteresowanemu zarówno analizę porównawczą jak i znalezienie danych odnośnie interesującego go układu w literaturze źródłowej. Autor sam podjął się próby podsumowania częstotliwości występowania poszczególnych typów przemian rozmiarowych i umieścił je w Tabeli 9 (str. 236) oraz Tabeli 10 dla przemian magnetycznych. Sam spis literatury cytowanej w bazie to kolejne 16 stron rozprawy habilitacyjnej.

Często spotykamy sytuację, gdy faza, pojawiająca się w nanokryształach, jest tożsama z fazą wysokotemperaturową występującą dla dużych krystalitów badanej substancji. Można wówczas

nakreślić linię określającą jak zmniejszanie rozmiaru krystalitów wpływa na obniżenie (lub podwyższenie) temperatury przemiany fazowej. Otrzymujemy wykres zależności: wielkość ziarna - temperatura przemiany fazowej. Jeżeli jednak tworzy się kilka faz lub faza nanokrystaliczna nie jest tożsama z fazą wysokotemperaturową, to konstrukcja rozmiarowych diagramów fazowych staje się problematyczna. Dla przezwyciężenia tych trudności Autor proponuje w rozdziale szóstym koncepcję diagramu wyspowego (nazywanego pierwotnie diagramem bąbelkowym).

Rozdział 7 opisuje rozmiarowe przejścia fazowe w układzie rozmiar - ciśnienie. Punktem wyjścia jest zależność ciśnienia niezbędnego do powstania fazy wysokociśnieniowej od rozmiaru krystalitu (analogicznie jak dla układów rozmiar – temperatura).

Baza przemian rozmiarowych zachodzących przy zmianie ciśnienia zewnętrznego została zamieszczona w tabeli 13 (Str. 269) i obejmuje ona 8 stron tekstu a powiązane z nią odnośniki literaturowe 5 i pół strony. Ujęte w niej są 203 przemiany fazowe zachodzące w 124 nieorganicznych krystalitach. Analiza anomalnej ściśliwości objętościowej zachodząca w nanokryształach doprowadza Habilitanta do wniosku, że model nanocząstek typu „rdzeń-powłoka” nie jest konieczny (daje wręcz błędne wskazania) do wyjaśnienia tego zjawiska, które może być interpretowane faktem istnienia rozrzutu wielkości krystalitów w próbce, co prowadzi do układu dwufazowego nanokryształów.

W rozdziale 8 opisywane są badania własne Pawła Tomaszewskiego. Obejmują one przemiany rozmiarowe zaobserwowane w obrębie wolframianów(VI), glinianów, spineli chromowych, niobianów i manganianów(III), fosforanów(V) czy dikrzemianów, zwykle domieszkowanych jonami lantanowców.

Wypełniając obowiązki recenzenta wymienię nieliczne zauważone literówki i błędy techniczne: str. 343 linia 5d, jest: „w rozdziale 8 monografii” powinno być „w rozdziale 7 monografii”, str. 110 linia 1g, jest: „FWHN” powinno być „FWHM”, niepoprawne tłumaczenie: w pliku „Summary.pdf” Str. 4 14d: „lithium crystal (volumetric)” jako tłumaczenie „kryształ lity (objętościowy)”. Błędy te oczywiście nie wpływają na zdecydowanie pozytywny odbiór monografii.

Podsumowując należy stwierdzić, że Habilitant Paweł E. Tomaszewski w swej pracy habilitacyjnej zawarł wyniki mające istotny wpływ na rozwój dyfrakcyjnych metod badań nanokrystalitów. Utworzył bazy danych rozmiarowych przejść fazowych, obejmujące układy rozmiar-temperatura oraz rozmiar-ciśnienie. Stworzył ideę opisywania tych przemian fazowych w postaci wykresów wyspowych i podał sposób klasyfikacji typów przemian (od A1 do E4). Ponadto jego praca habilitacyjna stanowi wiarygodne kompendium wiedzy i może stanowić dobry punkt startowy lub punkt odniesienia dla osób prowadzących badania rozmiarowych przemian fazowych nanokrystalitów. Zawiera kompetentny opis metod wyznaczania rozmiaru krystalitów oraz bazy danych zaobserwowanych rozmiarowych przemian fazowych (klasycznych oraz magnetycznych) w nanokryształach (głównie nieorganicznych).

Aktywność naukowa, inne badania i działalność organizacyjno-dydaktyczna

Wypełniając rolę recenzenta, oprócz analizy dostarczonych materiałów, przeprowadziłem ocenę całości aktywności naukowo-publikacyjnej dra Pawła Tomaszewskiego przy użyciu serwisu Scopus. W przedziale czasowym 1979-2025 znalazłem w tej bazie (stan 25.05.2025) w Jego dorobku 128 publikacji, indeks Hirscha 22, liczba cytowań 1584. Zapis pod numerem ORCID 0000-0002-6688-7762 podaje go jako autora 150 prac (66 validated works and 84 self-asserted works). W bazie tej

też znajdujemy informację o aktywności w recenzowaniu prac naukowych (zarejestrowano 11 recenzji dla 4 czasopism). Są to dane spójne z przedstawionymi we wniosku, choć można zauważyć pewne rozbieżności związane prawdopodobnie z dostępnością czy klasyfikacją niektórych pozycji. Dodam, że dbałość o prawdę naukową i wiarygodność opublikowanych informacji skłoniła Pawła Tomaszewskiego do wysłania licznych komentarzy do opublikowanych prac innych autorów, co opisano w monografii na stronach 316-318. W latach 2018-2024 zredagował i wysłał bardzo wiele tych komentarzy (wewnątrz monografii jest mowa o 180, a w materiałach <autoreferat.pdf> i na okładce już nawet 250!) z czego opublikowano około 40, na przestrożę autorom, którzy często błędnie interpretowali dyfraktogramy proszkowe wskazując na nowy, nieistniejący związek lub popełniając inne podstawowe błędy. Spowodowało to wycofanie z obiegu szeregu błędnych prac. Do dokonań dydaktycznych należałoby również dodać prowadzenie zajęć z krystalografii dla studentów Uniwersytetu Wrocławskiego, opiekę nad 3 pracami inżynierskimi oraz wielokrotny udział w Dolnośląskim Festiwalu Nauki.

Baza CSD w wersji 6.00 z marca 2025 podaje, że Paweł Tomaszewski w latach 1984-2025 nie był współautorem zaangażowanym w wyznaczenie pełnych struktur krystalicznych monokryształów. Wynika z tego, że wszelkie badania dotyczyły dyfrakcji proszkowej (polikrystalicznej).

Baza Scopus podaje, że 39.7% współautorów publikacji Habilitanta jest spoza Polski, co świadczy o dobrej współpracy międzynarodowej i przynajmniej częściowo jest pokłosiem odbytych staży naukowych.

Jednoautorska praca z 1992 roku "Structural phase transitions in crystals I. database" (opublikowana w *Phase Transitions* **38**, 127-220) została zacytowana do dziś 153 razy, co świadczy o przydatności i dobrej rozpoznawalności tego fragmentu osiągnięcia Habilitanta wśród naukowej społeczności międzynarodowej.

Paweł Tomaszewski od 1975 roku jest członkiem Polskiego Towarzystwa Fizycznego, a od 2009 roku jest członkiem Polskiego towarzystwa Krystalograficznego. Jest też członkiem Komisji Historii Nauki w Polskiej Akademii Umiejętności. Jego zainteresowania historią nauki skupiają się przede wszystkim na zgłębianiu i popularyzacji życiorysu i dokonań jednego z najbardziej zasłużonych polskich naukowców jakim był Jan Czochralski. W tym zakresie dokonania Habilitanta można określić jako nieprzeciętne czy wręcz niespotykane w skali polskiej a pewnie również światowej: publikacja 4 książek o Czochralskim (jednej w języku angielskim), udział w realizacji pełnometrażowych filmów dokumentalnych („Powrót chemika” (powstały wersja polska, angielska i niemiecka) i „Geniusze i marzyciele. Jan Czochralski”), wiele plakatów, audycji radiowych i telewizyjnych, szereg artykułów i referatów ustnych oraz redakcja 400 numerów „Biuletynu Roku Czochralskiego”.

Zagadnienia, które chciałem poruszyć w trakcie kolokwium to:

1. W jakim zakresie model nanocząstki określanej jako „core-shell” spełnia swoją rolę, a kiedy należy z niego zrezygnować?
2. Jak ogólnie widzi Pan rolę dyfrakcji elektronowej w badaniu struktury nanokryształów? Jaki może ona wywrzeć wpływ na badanie rozmiarowych przemian fazowych?

Uwagi końcowe, podsumowanie

Przedstawione mi do oceny osiągnięcie naukowe Pawła E. Tomaszewskiego a także publikacje oraz pozostałe materiały prezentują wysoki poziom naukowy i edytorski i w pełni uzasadniają wniosek o nadanie stopnia doktora habilitowanego. Uważam, że Habilitant jest samodzielnym uczonym zasługującym na wnioskowany awans. Posiada znaczny i wartościowy dorobek naukowy, który przyczynił się do rozwoju teorii i praktyki badań nad nanokryształami. Wniósł również wybitny wkład w propagowanie historii nauki. Przedstawiona praca habilitacyjna stanowi spójne dzieło i stanowi wartościowy punkt odniesienia na temat rozmiarowych przemian fazowych dla innych badaczy. Habilitant wykazuje znaczną aktywność naukową posiadając duży dorobek naukowy poza głównym osiągnięciem naukowym. W związku z powyższym stwierdzam, że Pan Dr Paweł E. Tomaszewski spełnia ustawowe (*Ustawa z dnia 20 lipca 2018 r. – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (tekst jednolity: Dz. U. z 2023 r. poz. 742 z późn. zm.)*) wymagania stawiane kandydatom podczas ubiegania się o stopień naukowy doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie – nauki fizyczne. Wnoszę o dopuszczenie Go do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

Z wyrazami szacunku

prof. dr hab. inż. Jarosław Chojnacki