

Recenzja osiągnięcia habilitacyjnego, aktywności naukowej oraz dorobku naukowo-dydaktycznego dr Darii Szewczyk w związku z postępowaniem o nadanie stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne

1. Przebieg kariery naukowej Habilitantki

Pani dr Daria Szewczyk ukończyła studia na Politechnice Wrocławskiej, uzyskując w 2011 r. tytuł inżyniera na kierunku Fizyka Techniczna, specjalność Fotonika, a w 2012 r. – tytuł inżyniera na kierunku Elektrotechnika oraz tytuł magistra Fizyki Technicznej, specjalność Nanoinżynieria. Jej praca magisterska, której promotorem był dr hab. Adam Sieradzki, została wyróżniona.

W 2019 r. Habilitantka uzyskała stopień doktora nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne, nadany przez Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN we Wrocławiu, na podstawie rozprawy doktorskiej pt. „Transport ciepła w polimorficznych fazach kryształów molekularnych z długozasięgowym uporządkowaniem”. Rozprawa ta również została wyróżniona. Promotorem pracy doktorskiej był prof. dr hab. Andrzej Jeżowski.

Od września 2019 r. dr Daria Szewczyk jest zatrudniona na stanowisku adiunkta w INTiBS PAN. W 2022–2023 odbyła staż podoktorski na Universidad Autónoma de Madrid w Hiszpanii, w grupie prof. M.A. Ramosa, jako stypendystka prestiżowego programu BEKKER NAWA. W 2020 r. odbyła również dwa krótkoterminowe pobyty naukowe na Uniwersytecie Umeå w Szwecji, o łącznym czasie trwania siedmiu tygodni. Staże te zostały zrealizowane w ramach projektu MINIATURA3 finansowanego przez Narodowe Centrum Nauki, we współpracy z prof. Ove Anderssonem.

Od grudnia 2024 r. Habilitantka pełni funkcję pełnomocnika dyrektora ds. popularyzacji nauki w INTiBS PAN.

Przebieg kariery naukowej dr Darii Szewczyk świadczy o konsekwentnym rozwoju naukowym i stopniowym poszerzaniu kompetencji badawczych w obszarze fizyki niskich temperatur, właściwości cieplnych ciał stałych oraz zjawisk szklopodobnych występujących w materiałach krystalicznych i amorficznych. Istotnym elementem tego rozwoju jest również systematyczne umiędzynarodowienie działalności badawczej Habilitantki, czego wyrazem są zarówno zagraniczne staże naukowe, jak i wieloletnia współpraca z czołowymi ośrodkami badawczymi w Europie.

2. Ocena całokształtu dorobku publikacyjnego

Z przedstawionego wykazu dorobku wynika, że po uzyskaniu stopnia doktora Habilitantka opublikowała kilkadziesiąt artykułów naukowych w renomowanych czasopismach międzynarodowych, w tym m.in. *Physical Review B*, *The Journal of Physical Chemistry Letters*, *Nature Communications*, *Chemistry of Materials*, *Advanced Science*, *Journal of Physics: Condensed Matter*, *Scientific Reports* oraz *Journal of Applied Physics*. W wielu z tych publikacji pełniła funkcję pierwszego i/lub autora korespondencyjnego, co potwierdza jej znaczący udział w inicjowaniu, prowadzeniu i koordynowaniu badań.

Według danych naukometrycznych przedstawionych w dokumentacji na dzień 31 marca 2026 r. dorobek Habilitantki obejmuje 51 publikacji indeksowanych w bazie Scopus. Publikacje te charakteryzują się wysoką widocznością naukową – były cytowane 528 razy według Scopus, 642 razy według Google Scholar oraz 478 razy według Web of Science. Indeks Hirscha Habilitantki wynosi 14. Łączna wartość współczynników Impact Factor czasopism, w których ukazały się publikacje, wynosi 201,8. Wartość ta, podobnie jak pozostałe wskaźniki bibliometryczne, potwierdza dobrą rozpoznawalność dorobku Habilitantki w międzynarodowym środowisku naukowym.

Dorobek publikacyjny dr Szewczyk koncentruje się przede wszystkim wokół zagadnień niskotemperaturowych właściwości termicznych oraz zjawisk szklopodobnych. Jednocześnie Habilitantka z powodzeniem podejmuje badania dotyczące innych klas materiałów, m.in. niskowymiarowych form węgla i ich pochodnych, perowskitów oraz manganitów. Świadczy to o szerokim warsztacie badawczym oraz umiejętności wykorzystywania doświadczenia zdobytego w badaniach właściwości cieplnych i dynamiki drgań w odniesieniu do różnych układów materiałowych.

Na szczególne podkreślenie zasługuje szeroka i trwała współpraca międzynarodowa Habilitantki z uznanymi badaczami zajmującymi się m.in. kalorymetrią niskotemperaturową, dynamiką fononową oraz zjawiskiem piku bozonowego (*boson peak*). Obejmuje ona współpracę z prof. M.A. Ramosem i prof. J. Ll. Tamaritem z Hiszpanii, a także wieloletnią współpracę z ośrodkami ukraińskimi, m.in. z prof. A.I. Krivchikovem i dr. V. Sumarokovem z Instytutu B. Verkina. Habilitantka współpracuje również z naukowcami z Belgii, w tym z prof. Ph. Vanderbemdenem, z Włoch – m.in. z dr. M. Cassetta i prof. G. D'Angelo – oraz z Litwy, m.in. z dr. M. Šimenasem. Współpraca ta ma charakter długofalowy i systematycznie prowadzi do powstawania wspólnych publikacji oraz realizacji projektów badawczych.

Całokształt dorobku publikacyjnego Habilitantki oceniam bardzo wysoko, zarówno pod względem jakościowym, jak i ilościowym. Dorobek ten wskazuje na znaczącą aktywność publikacyjną, dobrą międzynarodową rozpoznawalność oraz postępującą samodzielność naukową dr Darii Szewczyk.

3. Ocena osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę postępowania habilitacyjnego

3.1. Charakter i spójność osiągnięcia

Podstawę postępowania habilitacyjnego stanowi cykl ośmiu powiązanych tematycznie artykułów naukowych, opublikowanych w latach 2021–2025, przedstawionych pod wspólnym tytułem:

„Uniwersalny charakter anomalii szklopodobnych w ciałach krystalicznych: zintegrowane badania ciepła właściwego (pik bozonowy) i przewodnictwa cieplnego (wkład koherencyjny)”.

Cykl obejmuje prace oznaczone [H1]–[H8] i charakteryzuje się wyraźną spójnością tematyczną. Łączy dwa wzajemnie uzupełniające się obszary badań: (i) problem uniwersalności anomalii szklopodobnych obserwowanych w niskotemperaturowym cieple właściwym, w szczególności zjawiska piku bozonowego, oraz (ii) mechanizmy transportu ciepła w materiałach o złożonej strukturze i częściowym nieuporządkowaniu, analizowane z wykorzystaniem współczesnych modeli przewodnictwa cieplnego, w tym formalizmu Wignera.

W przeważającej większości prac, tj. [H1]–[H6] oraz [H8], Habilitantka jest pierwszym i/lub autorem korespondencyjnym. Z przedstawionej dokumentacji wynika, że w badaniach tych odpowiadała za wykonanie kluczowych pomiarów ciepła właściwego lub przewodnictwa cieplnego, a także za zaawansowaną analizę uzyskanych danych eksperymentalnych. Jej udział w powstaniu cyklu należy zatem uznać za zasadniczy, zarówno na poziomie eksperymentalnym, jak i interpretacyjnym.

3.2. Najważniejsze wyniki naukowe

Za jedno z najważniejszych osiągnięć cyklu uważam wykazanie, że anomalia w postaci piku bozonowego nie jest zjawiskiem ograniczonym do materiałów amorficznych lub silnie nieuporządkowanych.

W pracy [H7] wykazano, że zjawisko typu *boson peak* występuje również w całkowicie uporządkowanych, silnie anharmonicznych kryształach molekularnych benzofenonu oraz jego bromopochodnych. Połączenie precyzyjnych badań eksperymentalnych z obliczeniami metodą DFT pozwoliło wskazać dwa główne mechanizmy odpowiedzialne za powstawanie obserwowanej anomalii: silne sprzężenie fononów akustycznych z niskoenergetycznymi modami optycznymi, prowadzące do zjawiska *avoided crossing*, oraz spiętrzenie niskoenergetycznych, quasi-zlokalizowanych modów optycznych.

Szczególnie istotny jest wniosek, że nieporządek strukturalny nie jest warunkiem koniecznym występowania piku bozonowego. Co więcej, mimo pełnego uporządkowania translacyjnego badane kryształy wykazują w zakresie niskotemperaturowej dynamiki drgań zaskakujące podobieństwo do materiałów amorficznych. Wynik ten ma istotne znaczenie dla dyskusji nad fizycznym pochodzeniem piku bozonowego i pozwala spojrzeć na to zjawisko szerzej niż przez pryzmat klasycznego podziału na materiały krystaliczne i amorficzne.

W pracy [H8] Habilitantka przeprowadziła szczegółowe badania właściwości termodynamicznych i wibracyjnych 1-fluoroadamantanu. Wykazała obecność wyraźnego maksimum funkcji C_p/T^3 , odpowiadającego pikowi bozonowemu, przy jednoczesnym braku klasycznych układów dwupoziomowych (TLS), charakterystycznych dla tradycyjnych szkielek strukturalnych. Analiza widma drgań ujawniła, że za obserwowaną anomalię odpowiadają

przede wszystkim niskoenergetyczne, quasi-zlokalizowane („miękkie”) mody optyczne, silnie sprzęgające się z modami akustycznymi.

Na szczególne podkreślenie zasługuje wykazanie niemal liniowej zależności pomiędzy energią pierwszego zlokalizowanego modu optycznego a temperaturą maksimum pików bozonowych, potwierdzonej również dla innych pochodnych adamantanu. Wynik ten stanowi istotny argument na rzecz istnienia bardziej uniwersalnego związku pomiędzy strukturą molekularną, dynamiką orientacyjną i niskoenergetycznymi wzbudzeniami drganiowymi.

Kolejnym istotnym elementem osiągnięcia jest praca [H1], w której Habilitantka badała uniwersalność anomalii szkłopodobnych w szerokiej i zróżnicowanej grupie perowskitów halogenkowych ołowiu. Analiza dziewięciu materiałów różniących się wymiarowością struktury, składem chemicznym oraz rodzajem kationu i halogenku wykazała występowanie pików bozonowych we wszystkich badanych układach.

Szczególnie wartościowe jest zastosowanie bezwymiarowej funkcji normalizującej Δ^* , która po uwzględnieniu wkładu związanego z tunelowaniem prowadzi do nałożenia danych eksperymentalnych na wspólną krzywą. Rezultat ten stanowi argument na rzecz uniwersalnego charakteru nadmiarowego ciepła właściwego w badanej klasie materiałów i pokazuje, że odpowiednie skalowanie i normalizacja mogą ujawnić regularności niewidoczne w bezpośredniej analizie danych eksperymentalnych.

W pracy [H2], poświęconej quasi-planarnym kryształom molekularnym charakteryzującym się minimalnym nieporządkiem orientacyjnym, Habilitantka potwierdziła występowanie charakterystycznych anomalii szkłopodobnych, w tym liniowego wkładu do ciepła właściwego związanego z układami TLS oraz pików bozonowych. Szczególnie interesujące jest wykazanie liniowej korelacji pomiędzy temperaturą pików bozonowych a temperaturą Debye’a, zgodnej z relacją Granato .

Wynik ten wskazuje na istotny związek pomiędzy globalnymi właściwościami sprężystymi kryształu a lokalnymi wzbudzeniami odpowiedzialnymi za powstawanie pików bozonowych. Jednocześnie przeprowadzona analiza porównawcza pokazuje, że choć mikroskopowe mechanizmy odpowiedzialne za występowanie pików bozonowych w kryształach i szklach nie muszą być identyczne, materiały te mogą wykazywać wspólne, uniwersalne cechy niskotemperaturowej dynamiki drgań.

Istotnym rozszerzeniem tych badań jest praca [H5], w której analizę uniwersalnego charakteru pików bozonowych przeniesiono na materiały polimerowe i nanokompozyty polimerowe. Wykazano, że zarówno czysty ABS, jak i jego kompozyt zawierający 0,5% wag. termicznie zredukowanego tlenku grafenu (trGO) wykazują wyraźny pik bozonowy, podlegający tej samej uniwersalnej zależności skalującej Δ^* , obserwowanej wcześniej dla szerokiej klasy materiałów amorficznych i krystalicznych.

Wynik ten wzmacnia argumentację na rzecz szerokiego, być może uniwersalnego charakteru analizowanej anomalii i wskazuje, że jej występowanie nie jest ograniczone do określonego typu materiału ani do określonego poziomu nieuporządkowania strukturalnego. Dodatkowo wykazano, że w sąsiedztwie maksimum pików bozonowych jego kształt można z powodzeniem

opisać za pomocą symetrycznej funkcji kwadratowej, co wskazuje na kolejną regularność wspólną dla różnych materiałów wykazujących właściwości szklopodobne.

Na uwagę zasługuje również analiza wpływu niewielkiego dodatku trGO na właściwości cieplne ABS. Wykazano, że dodatek zaledwie 0,5% wag. nanowypełniacza prowadzi do około 1,4-krotnego zwiększenia liniowego wkładu do ciepła właściwego w temperaturach poniżej 1 K. Wynik ten pokazuje, że nawet niewielka modyfikacja składu może prowadzić do istotnej zmiany niskotemperaturowej odpowiedzi termicznej materiału.

Uzupełnieniem tych badań są eksperymenty dotyczące wpływu deformacji plastycznej. Wykazano, że deformacja powoduje obniżenie wysokości pików bozonowych oraz przesunięcie jego maksimum w kierunku niższych temperatur, co wskazuje na znaczną wrażliwość niskoenergetycznych wzbudzeń na stan strukturalny polimeru. Praca [H5] łączy zatem badania podstawowe nad uniwersalnością pików bozonowych z analizą możliwości kontrolowania właściwości cieplnych polimerów i ich nanokompozytów.

Prace [H3] i [H6] rozszerzają zakres badań na problem transportu ciepła w materiałach o złożonej strukturze. W pracy [H3] Habilitantka wykazała, że przewodnictwo cieplne 1-fluoroadamantanu silnie zależy od historii termicznej oraz stanu strukturalnego materiału. Szczególnie istotnym wynikiem jest stwierdzenie nieodwracalnej transformacji prowadzącej do stanu o cechach amorficznych, w którym przewodnictwo cieplne jest wyraźnie niższe i wykazuje charakterystyczne dla materiałów szklistych plateau.

Analiza zależności $\kappa(T)$ ujawniła ponadto obecność dodatkowego, aktywowanego termicznie wkładu do transportu ciepła zarówno w fazie krystalicznej, jak i amorficznej. Wyniki te stanowią interesujące uzupełnienie badań termodynamicznych i wskazują na ścisły związek pomiędzy strukturą materiału, jego dynamiką niskoenergetyczną a mechanizmami transportu energii.

Praca [H6] stanowi natomiast szerszą analizę przewodnictwa cieplnego w kryształach o złożonej strukturze, w tym w klatratkach i skutterudytach, i wpisuje się w rozwój współczesnych modeli transportu uwzględniających zarówno klasyczny transport fononowy, jak i koherencyjne, falowe procesy tunelowania między sprzężonymi stanami drganiowymi.

Szczególnie wartościowym rezultatem jest zaproponowanie uproszczonego wykładniczego opisu wkładu koherentnego w postaci: $\kappa_c(T) = \kappa_0 \exp(-E/T)$. Podejście to umożliwia ilościową analizę wkładu związanego z transportem typu dyfuzonowego w materiałach, w których klasyczny opis fononowy okazuje się niewystarczający. Wykazano przy tym, że parametry modelu zależą od struktury krystalicznej, stopnia nieuporządkowania oraz składu materiału. Wskazuje to na potencjalną przydatność proponowanego opisu również w analizie i projektowaniu materiałów o kontrolowanych właściwościach transportu ciepła, w szczególności materiałów mogących znaleźć zastosowanie w termoelektryce.

Całość przedstawionych prac tworzy spójny i wielowątkowy obraz badań nad niskotemperaturowymi właściwościami termicznymi oraz transportem energii w materiałach o różnym stopniu uporządkowania – od kryształów molekularnych, poprzez perowskity i polimery, aż po złożone kryształy klatratowe i skutterudyty.

Za szczególnie wartościowe uważam konsekwentne wykazywanie, że zjawiska tradycyjnie kojarzone z nieuporządkowaniem strukturalnym, takie jak pik bozonowy i inne szkłopodobne anomalie cieplne, mogą występować również w materiałach posiadających uporządkowaną sieć translacyjną. Habilitantka nie ogranicza się przy tym do identyfikacji tych zjawisk, lecz podejmuje próbę określenia ich mikroskopowego pochodzenia, wskazując na rolę niskoenergetycznych modów optycznych, ich sprzężenia z fononami akustycznymi, anharmoniczności oraz koherentnych mechanizmów transportu.

Istotnym walorem osiągnięcia jest również umiejętne wykorzystanie skalowania oraz stosunkowo prostych modeli fenomenologicznych do identyfikacji uniwersalnych prawidłowości w pozornie bardzo różnych klasach materiałów.

W mojej ocenie przedstawiony cykl prac stanowi spójny, oryginalny i wartościowy wkład w rozwój wiedzy dotyczącej niskotemperaturowej dynamiki drgań oraz mechanizmów transportu ciepła w materiałach krystalicznych, amorficznych i szkłopodobnych.

5. Ocena aktywności naukowej, dydaktycznej, organizacyjnej oraz zdolności do kierowania badaniami

Aktywność naukową Habilitantki oceniam bardzo wysoko. Obejmuje ona liczne wystąpienia na konferencjach międzynarodowych, w tym wykłady na zaproszenie oraz prezentacje ustne poświęcone m.in. zjawiskom szkłopodobnym w kryształach molekularnych i polimerach. Dr Szewczyk aktywnie uczestniczy również w międzynarodowych programach badawczych i sieciach współpracy, w tym w projektach realizowanych w ramach programu COST, takich jak NanoSpace, BEST-CSP, SUPERQUMAP oraz zrealizowany już projekt EsSENce.

Pozytywnie oceniam także działalność organizacyjną Habilitantki. Na szczególne uznanie zasługuje pełnienie funkcji pełnomocnika dyrektora ds. popularyzacji nauki w INTIBS PAN, koordynowanie działalności Dolnośląskiego Festiwalu Nauki w instytucie macierzystym oraz współorganizowanie cyklu międzynarodowych seminariów „Thermal Kharkiv Seminars”. Habilitantka była również zaangażowana w prace komitetów organizacyjnych konferencji naukowych, m.in. EURAMET TC-Thermometry 2024 oraz 12th International Conference on Cryocrystals.

W sferze dydaktycznej i kształcenia młodej kadry naukowej Habilitantka wykazuje znaczące zaangażowanie. Obejmuje ono zarówno opiekę nad pracami dyplomowymi studentów Politechniki Wrocławskiej i Uniwersytetu Wrocławskiego, jak i pełnienie funkcji promotora pomocniczego w przewodach doktorskich oraz koordynowanie pobytów zagranicznych doktorantów i stażystów naukowych.

Na szczególne uznanie zasługuje aktywność Habilitantki w zakresie pozyskiwania środków na badania naukowe. Dr Szewczyk z sukcesem pozyskała finansowanie w ramach programu MINIATURA NCN oraz prestiżowe stypendium BEKKER NAWA, które umożliwiły jej realizację zagranicznych staży naukowych, rozwój warsztatu badawczego i nawiązanie trwałych kontaktów międzynarodowych.

Szczególnie istotnym osiągnięciem jest również uzyskanie przez Habilitantkę, w charakterze kierownika projektu, finansowania w ramach konkursu NCN OPUS 27 na realizację projektu

pt. „Badanie uniwersalnych zależności nadmiarowego ciepła właściwego w nieuporządkowanych i częściowo uporządkowanych ciałach stałych”. Samodzielne przygotowanie projektu, uzyskanie finansowania w konkurencyjnym konkursie oraz odpowiedzialność za jego realizację stanowią ważne potwierdzenie dojrzałości naukowej Habilitantki, jej zdolności do formułowania własnych problemów badawczych oraz do samodzielnego kierowania przedsięwzięciem naukowym.

Całokształt aktywności naukowej, dydaktycznej i organizacyjnej dr Darii Szewczyk wskazuje zatem na ukształtowaną samodzielność naukową, zdolność do inicjowania i prowadzenia własnego programu badawczego oraz dobre przygotowanie do pełnienia funkcji lidera zespołów i projektów naukowych.

6. Konkluzja

Po zapoznaniu się z autoreferatem, wykazem osiągnięć naukowych, informacjami dotyczącymi działalności naukowej, dydaktycznej i organizacyjnej oraz publikacjami wchodzącymi w skład osiągnięcia habilitacyjnego stwierdzam, że:

1. przedstawiony cykl ośmiu publikacji stanowi spójne, oryginalne i wartościowe osiągnięcie naukowe;
2. osiągnięcie to wnosi znaczny wkład w rozwój dyscypliny nauki fizyczne, w szczególności w zakresie fizyki materii skondensowanej, niskotemperaturowych właściwości termicznych ciał stałych oraz mechanizmów transportu ciepła;
3. Habilitantka wykazuje bardzo wysoką aktywność naukową, znaczący dorobek publikacyjny oraz szeroką i trwałą współpracę międzynarodową;
4. jej działalność naukowa, dydaktyczna i organizacyjna, a także osiągnięcia w zakresie pozyskiwania i realizacji projektów badawczych, potwierdzają osiągnięcie dojrzałości i samodzielności naukowej właściwej dla osoby ubiegającej się o stopień doktora habilitowanego;
5. całokształt przedstawionego dorobku spełnia wymagania stawiane kandydatom ubiegającym się o nadanie stopnia doktora habilitowanego, określone w art. 219 ust. 1 pkt 2 i 3 ustawy – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce.

W związku z powyższym stwierdzam, że dr Daria Szewczyk spełnia wszystkie wymagania stawiane osobom ubiegającym się o nadanie stopnia doktora habilitowanego. W pełni popieram zatem wniosek o nadanie dr Darii Szewczyk stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne.

Prof. dr hab. Marian Paluch