

Ocena dorobku naukowego Pani dr inż. Marceli Trybuły w postępowaniu w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dyscyplinie inżynieria materiałowa

Podstawą formalną opracowania niniejszej recenzji jest informacja, iż Rada Naukowa Instytutu Metalurgii i Inżynierii Materiałowej im. A. Krupkowskiego PAN powołała mnie na recenzenta w postępowaniu o nadanie stopnia doktora habilitowanego dr Marceli Trybuły, przekazana pismem z dn. 26 lipca 2023 r. przez Zastępcę Dyrektora ds. Ogólnych, Dr hab. Annę Wierzbicką-Miernik, profesora Instytutu.

Dr. Marcela Trybuła otrzymała dyplom na Wydziale Chemii (Chemia teoretyczna) Uniwersytetu Jagiellońskiego w 2010 r. broniąc pracę magisterską pt. „Teoretyczny opis wiązania chemicznego w łańcuchach węglowych”. Pracę doktorską pt. „Thermodynamic, structural and physicochemical properties of liquid Al-Li-Zn alloys” obroniła w Instytucie Metalurgii i Inżynierii Materiałowej, Polskiej Akademii Nauk w Krakowie w 2015 r. Promotorami pracy był Prof. dr hab. inż. Władysław Gąsior, Instytut Metalurgii i Inżynierii Materiałowej Polska Akademia Nauk oraz Prof. Alain Pasturel, Grenoble University of Technology, Grenoble-INP, Francja.

Dr Marcela Trybuła wskazała jako główne osiągnięcie naukowe cykl powiązanych tematycznie publikacji o wspólnym tytule „Struktura materiałów krystalicznych, amorficznych i ciekłych na poziomie atomowym w ujęciu metod dynamiki molekularnej i analizy topologicznej”.

Na cykl składa się 7 powiązanych tematycznie prac, w tym w 5 pracach, dr inż. Marcela Trybuła jest pierwszą, zaś w pozostałych jest trzecią autorką. Prace cyklu zostały opublikowane w czasopismach z listy JCR (Journal Citation Reports – „listy filadelfijskiej”). Sumaryczny Impact Factor dla cyklu prac, liczony według roku wydania wynosi 26,008, natomiast łączna liczba punktów w punktacji MEiN to 580.

Kierunkiem badawczym podjętym w cyklu prac powiązanych tematycznie był opis struktury i właściwości materiałów krystalicznych, amorficznych i ciekłych metodami dynamiki molekularnej i analizy topologicznej.

W zależności od rodzaju materiałów Autorka wyróżniła następujące szczegółowe cele badawcze:

- opis struktury i jej wpływu na właściwości ciekłych metali i stopów wykorzystując metodę analizy Woronoja;
- rozszerzenie metody Woronoja dla materiałów polikrystalicznych;
- opis uporządkowania, struktury i kinetyki wzrostu cienkich warstw tlenkowych na podłożu krystalicznym i amorficznym w kontakcie z gazowym tlenem i z roztworem wodnym w ujęciu reaktywnej metody dynamiki molekularnej i analizy topologicznej.

Jako obiekt badań, wybrano aluminium i jego stopy. Znajdują one zastosowanie w przemyśle lekkim, poczynając od zastosowań codziennego użytku do zastosowań bardziej zaawansowanych, w przemyśle lotniczym, samochodowym itd.

Prace prezentujące wyniki prowadzonych badań stanowią spójną całość, wzajemnie się uzupełniającą i prowadzącą do wspólnych, dotyczących podjętego obszaru badań wniosków.

Na ich podstawie Pani Dr Marcela Trybuła wymieniła najważniejsze wyniki badań podjętych w cyklu prac:

- lokalne uporządkowanie ikosaedryczne bliskiego zasięgu (ISRO) ma korzystny wpływ na stabilizację stanu ciekłego, co wynika z ich gęsto upakowanej struktury i wpływu na zachowanie właściwości transportowych, termodynamicznych jak również na kąt zwilżania i powierzchnię rozprętu;
- opracowana metodologia umożliwiła identyfikację i opis „cech topologicznych” uporządkowania w materiałach o zróżnicowanej strukturze;
- uzyskano spójny obraz wpływu „cech topologicznych” uporządkowania atomowego na strukturę rdzenia granicy ziarna jak i jego grubość i zachowanie entropii konfiguracyjnej;
- obecność naprężenia ściskającego w początkowych etapach utleniania wpływa na różnicę w strukturze i uporządkowaniu topologicznym dla dwóch powstałych ultracienkich warstw tlenku na podłożu Al(100) i Al(111);
- obecność klastrów AlO₅ i istnienia sieci losowo rozmieszczonych jonów tlenu w postaci mostków tlenkowych -O-O- w amorficznych warstwach tlenku powoduje wzrost swobodnej objętości i zmniejszeniem gęstości warstwy tlenku oraz wzrost nieuporządkowania struktury;
- możliwość analizy topologii sieci atomów i wiązań w ultracienkich warstwach tlenkowych.
- dynamika molekularna w połączeniu z analizą Woronoja otwiera nowe możliwości i perspektywy do badania zależności struktura-właściwości materiałów poddanych różnym czynnikom zewnętrznym.

Dostarczona dokumentacja wskazuje, że Pani dr Marcela Trybuła był bardzo dobrze przygotowana do doboru tematyki i metodyki badawczej, jak również do zdefiniowania celów i zakresu prowadzonych badań. Podstawą sukcesu w takich przypadkach, jest bardzo dobre i szczegółowe rozpoznanie analizowanej problematyki, co jest widoczne w dołączonych publikacjach, które bezdyskusyjnie wniosły istotny wkład w rozwój dyscypliny naukowej inżynieria materiałowa. Na podkreślenie zasługuje ogromny, merytoryczny, wkład Pani dr Marceli Trybuły w rozwiązanie problemów naukowych. Jako przykład wymienić można modyfikację parametrów do zmodyfikowanego modelu atomu zagnieżdżonego stosowanego w dynamice molekularnej, co w połączeniu z analizą Woronoja, pozwoliło na wytłumaczenie anomalii w zachowaniu struktury w ciekłym stopie Al₈₀Cu₂₀.

Bardzo ważnym wynikiem badań było potwierdzenie istnienia uporządkowania ISRO, w którym klaster atomów o symetrii pięciokąta dominują wpływając jednocześnie na powstanie gęsto upakowanej struktury ciekłych stopów. Na tej podstawie stwierdzono, że obserwowane zróżnicowanie w uporządkowaniu ISRO dla poszczególnych atomów w ciekłych stopach z układu Al-Cu, może wpływać na procesy zachodzące podczas chłodzenia cieczy, w tym, prowadzić może do tworzenia stopów o strukturze polikrystalicznej zamiast struktury amorficznej.

Zastosowane przez Autorkę podejście metodologiczne do opisu struktury ciekłej kropli podczas zwilżania powierzchni monokryształu było jednym z nielicznych dostępnych w literaturze podejść, które pozwoliło zaobserwować tworzenie się stopu AgCu o strukturze amorficznej na podłożu Cu bez grafenu.

Z kolei, kategoryzacja wskaźników Woronoja na podstawie wyników uzyskanych dla bikryształu Al o różnych kątach dezorientacji pozwoliła na dokładne scharakteryzowanie uporządkowania GB i struktury bikryształu, które było również możliwe dla polikryształu Al. Bardzo ważnym osiągnięciem jest pokazanie możliwości identyfikacji i opis „cech topologicznych” uporządkowania atomów, które pozwalają na poznanie struktury, topologii i uporządkowania atomów w granicy ziaren oraz ich zmian wywołanych nieregularnościami GB.

Kolejnym, istotnym, wynikiem prowadzonych badań było pokazanie wpływu podłoża Al o orientacji (100) i (111) na strukturę i topologię sieci atomów i ich połączeń dla ultracienkiego tlenku powstającego na powierzchni Al wskutek utleniania gazowym tlenem w temperaturze 300 K.

Wykazano, że różnice w uporządkowaniu atomowym mają wpływ na strukturę i dla dwóch powstałych warstw tlenkowych wynikają z obecności naprężenia ściskającego na początkowych etapach utleniania powierzchni Al(111). W rezultacie potwierdzono, że mała zawartość jednostek AIO5 w sprzyja tworzeniu się uporządkowanej struktury tlenku powstałego na podłożu Al(111) pomimo mniejszej grubości warstwy. Natomiast duża zawartość jednostek AIO5 przyczynia się do wzrostu nieuporządkowania co obserwowano dla warstw tlenku powstałego na podłożu Al(100).

Innym, bardzo ważnym wynikiem było zbadanie roli konfiguracji mostków tlenkowych -O-O- na strukturę, grubość i skład chemiczny warstw tlenkowych. Analiza konfiguracji mostków tlenkowych pozwoliła na uzyskanie informacji na temat rozmieszczenia porów w warstwach tlenku powstałych dla stałego ciśnienia tlenu w różnych temperaturach utleniania. Stwierdzono, że obserwowane zaburzenia strukturalne wynikają z obecności klasterów AIO5 i istnienia sieci losowo rozmieszczonych jonów tlenu w amorficznych warstwach tlenku, co prowadzi do wzrostu objętości swobodnej, a tym samym zmniejszeniem gęstości warstwy tlenku.

Wreszcie, zaproponowana kategoryzacja wskaźników Woronoja dla wspomnianych warstw pozwoliła pokazać utworzenie złożonej topologicznie sieci atomów i połączeń o strukturze amorficznej.

Większość z zaprezentowanych powyżej osiągnięć badawczych, stanowi oryginalny, niepublikowany wcześniej, wkład dr Marceli Trybuły.

Poza wskazanym cyklem publikacji, łączny dorobek dr Marceli Trybuły obejmuje 15 publikacji opublikowanych w czasopismach z listy Journal Citation Reports (JCR), z których 1 jest pracą autorską natomiast w 14 pozostałych jest współautorem. Spośród 11 prac, które ukazały się po uzyskaniu stopnia naukowego doktora, w 9 jest autorem korespondującym natomiast w 7 pracach jest 1 autorem. Ponadto jest współautorem w 5 pracach opublikowanych w materiałach pokonferencyjnych po uzyskaniu stopnia doktora. Artykuły w czasopismach z listy JCR indeksowane w bazie Web of Science uzyskały 150 cytowań (120 bez autocytowań), przy czym 116 z ogólnej liczby cytowań przypada na lata po uzyskaniu stopnia naukowego doktora. Indeks Hirscha jej publikacji według tej samej bazy wynosi 8. Na podkreślenie zasługuje, że wśród 8 najbardziej cytowanych prac w całym dorobku znajdują się 4 prace z cyklu prac zaliczonych do osiągnięcia naukowego. Sumaryczny Impact Factor (IF) czasopism z listy JCR (zgodnie z rokiem wydania, np.: dla publikacji z roku 2016 podano IF za rok 2015) wynosi 51,576 w tym po uzyskaniu stopnia naukowego doktora 43,577.

Dr. Marcela Trybuła może pochwalić się bogatą współpracą z ośrodkami naukowymi w kraju i za granicą. W kraju współpracuje m. in. z Collegium Medicum Uniwersytetu Jagiellońskiego, Wydziałem Inżynierii Materiałowej i Ceramiki AGH oraz z Instytutem Metali Nieżelaznych Sieć badawcza Łukasiewicz, Oddział w Skawinie. Z kolei ośrodkami zagranicznymi są: KTH (Szwecja), LANL (USA), Federal Institute for Materials Research and Testing, BAM, Niemcy. Współpraca ta obejmuje różne formy, m in. organizację sympozjów oraz prowadzenie wspólnych badań, również z udziałem przemysłu.

Pierwszą aktywnością naukową Pani dr. Marceli Trybuły po uzyskaniu stopnia doktora były badania mechanizmu wzrostu warstw tlenkowych podczas utleniania termicznego podłoża Al i jego stopów w ujęciu metod symulacji atomistycznych. Badania te realizowała podczas stażu podoktorskiego na Królewskim Instytucie Technologicznym (KTH Royal Institute of Technology), pod kierownictwem prof. Pavla Korzhavy'ego. Badania te były realizowane w ramach stypendium Carla Tryggersa „Atomistic simulations of thermal and chemical oxidation of Al metal and Al-based alloys” w latach 2017 ÷ 2018. Rezultatem aktywności naukowej była współorganizacja z prof. Pavlem Korzhavy'm sympozjum tematycznego pt „Predicting Interface Structure and Dynamics – From Atomic-to Meso-Scale”, na Kongresie Inżynierii Materiałowej w Niemczech (MSE) w roku 2018. W ramach aktywności naukowej realizowanej na stażu podoktorskim na KTH była również wykonawcą w projekcie ALUX, którego Liderem był Uniwersytet w Lund w konsorcjum z KTH oraz partnerem z sektora gospodarczego, grupą Hydro.

Kolejną aktywnością naukową wskazaną przez Panią dr Marcelę Trybułę była weryfikacja wyników obliczeniowych z danymi eksperymentalnymi dla korozji podłoża stopów Al dostarczonych przez grupę badawczą prowadzoną przez profesora Edvina Lundgrena z Uniwersytetu w Lund. Aktywność tę realizowała podczas czterodniowej wizyty na Wydziale Fizyki Uniwersytetu w Lund, podczas której wygłosiła referat na zaproszenie grupy badawczej kierowanej przez prof. Lundgrena. Tematem referatu był mechanizm wzrostu warstwy tlenkowej na powierzchni Al i jego stopu oraz czasowa zależność funkcji rozkładu atomów, co pozwoliło lepiej zrozumieć zjawiska zachodzące we wczesnych etapach wzrostu warstwy, mające znaczny wpływ na formowanie się struktur na późniejszych etapach wzrostu. Rezultaty współpracy zostały przedstawione na konferencjach o zasięgu międzynarodowym.

Trzecią aktywnością naukową po uzyskaniu stopnia doktora realizowała w Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznym Uniwersytetu Warszawskiego w grupie badawczej prowadzonej przez prof. Ewę Burską. Aktywność tę realizowała będąc zatrudniona w projekcie badawczym „Innovative and affordable service for the Preventive Conservation monitoring of individual Cultural Artefacts during display, storage, handling and transport” CollectionCare, Horizon 2020 jako adiunkt w Uniwersytecie Warszawskim. W projekcie zaangażowanych było 18 różnych partnerów w tym z sektora akademickiego i przemysłowego.

Kolejną aktywnością naukową realizowaną na uczelni zagranicznej było zapoznanie się z infrastrukturą badawczą dostępną w Instytucie Paul Sherrer w Szwajcarii, którą planuje wykorzystać do badania struktury materiałów krystalicznych i materiałów warstwowych. Aktywność tę realizowała podczas czterodniowej wizyty (w dniach 6.07-10.07.2015) w Research with Neutrons and Muons, Instytut Paul Sherrer, Willingen, Szwajcaria. Aktywność ta obejmowała również wygłoszenie referatu pt: „Multiscale description of structural and thermo-physical properties of liquid alloys”.

Ostatnią aktywnością naukową realizowaną na uczelni zagranicznej było przedstawienie możliwości i skuteczności metod współczesnej inżynierii materiałowej do analizy właściwości i struktury ciekłych stopów i materiałów metalicznych. Aktywność tę realizowała podczas tygodniowej wizyty w Uniwersytecie Aalto we wrześniu 2015 r. Podczas tej wizyty i w ramach aktywności naukowej wygłosiła referat pt: „Structure, thermophysics and thermodynamics of liquid metallic materials - multiscale description”.

Pani dr Marcela Trybuła była promotorem pomocniczym 2 prac doktorskich i promotorem jednej pracy magisterskiej. W roku 2017 prowadziła praktyki dla 3 studentów trzeciego roku studiów licencjackich z Wydziału Fizyki i Informatyki Uniwersytetu Jagiellońskiego. Prowadziła również staże naukowe łącznie dla siedmiu studentów z Akademii Górniczo-Hutniczej oraz Uniwersytetu Jagiellońskiego w latach 2017 i 2018. W roku 2017 była również opiekunem 2,5 miesięcznej praktyki studenckiej Dominiki Wieczorek w ramach programu ERASMUS realizowanym na Królewskim Instytucie Technologicznym (KTH) w Sztokholmie. Temat stażu „Atomistic simulations of grain boundary structure and migration in solid Al-based alloys”.

Po uzyskaniu stopnia doktora, czterokrotnie była współorganizatorem sympozjum w panelu Modelling and Simulations na kongresach Materials Science and Engineering (MSE) w Niemczech w latach 2016, 2018, 2020 i 2022. Sympozja, które organizowała dotyczyły różnych zagadnień związanych z wykorzystaniem metod obliczeniowych w inżynierii materiałowej. Po uzyskaniu stopnia doktora była również członkiem komitetu organizacyjnego konferencji TOFA 2022 o zasięgu międzynarodowym oraz członkiem komisji oceniającej wnioski o stypendia konferencyjne w konferencji TOFA 2022.

Pani dr Marcela Trybuła może pochwalić się też działalnością popularyzującą naukę. W marcu 2023 była członkiem zespołu organizacyjnego i realizującego Ogólnopolski Dzień Inżynierii Materiałowej w Instytucie Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN. Było to pierwsze tego rodzaju na skalę krajową wydarzenie poświęcone nowoczesnym materiałom inżynierskim i metodom ich otrzymywania i badania. Miało to na celu przybliżyć pracę naukowców w wielu laboratoriach a także poznać nowoczesne materiały, a tym samym zachęcić młodzież do podjęcia w przyszłości kierunków związanych z inżynierią materiałową.

Poza realizacją projektów badawczych, była kierownikiem projektu SONATA oraz wykonawcą w 3 projektach badawczych finansowanych przez Narodowe Centrum Nauki. Po uzyskaniu stopnia doktora była również zaangażowana w prace statutowe kierowane przez prof. dr hab. inż. Natalię Sobczak i dr hab. Joannę Wojewodę-Budkę prof. PAN oraz prof. Pawła Ziębę.

Ponadto brała udział jako osoba prezentująca i współautor wystąpienia w licznych konferencjach o zasięgu krajowym i międzynarodowym. Uczestniczyła również w seminariach o zasięgu krajowym i międzynarodowym, w tym, na zaproszenie, wygłosiła trzy referaty.

W roku 2020 otrzymała trzyletnie stypendium Ministra Edukacji i Nauki dla wybitnych młodych naukowców.

W roku 2022 otrzymała Brązowy Krzyż Zasługi za osiągnięcia naukowe nadany przez Prezydenta Rzeczypospolitej Polskiej.

Od roku 2020 jest członkiem panelu doradczego ds. tematycznych w czasopiśmie Crystals, MDPI.

W roku 2019 była członkiem komisji rekrutacyjnej IMIM PAN w sprawie o przyznania stypendium naukowego w projekcie badawczym nr 2015/19/B/ST8/01074. W roku 2022 była też członkiem komisji rekrutacyjnej w sprawie przyznania stypendium konferencyjnego TOFA 2022.

Była recenzentem 31 prac na zlecenie redakcji czasopism, m.in.: the Journal of Physical Chemistry Letters, Journal of Physical Chemistry, Archives of Metallurgy and Materials Science, Nano Research, Applied Surface Science, Computational Materials Science, Journal of Materials Science.

W podsumowaniu stwierdzam, że Pani dr Marcela Trybuła spełnia wymogi zgodnie z podstawą prawną, którą stanowi art. 219 ustawy z 20.07.2018 prawo o szkolnictwie wyższym i nauce tj. dz. U. z 2021 poz. 478. Posiada stopień doktora, posiada w dorobku osiągnięcia naukowe stanowiące znaczący wkład w rozwój wskazanej dyscypliny, w tym cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych opublikowanych w czasopismach naukowych, które w roku opublikowania artykułu w ostatecznej formie były ujęte w wykazie sporządzonym zgodnie z przepisami wydanymi na podstawie art. 267 ust. 2 pkt 2 lit. B oraz wykazuje istotną aktywność naukową realizowaną w więcej niż jednej instytucji.

