

Recenzja rozprawy habilitacyjnej dr Jacka Bogumiła Goska

Przedłożone mi do recenzji osiągnięcie naukowo - badawcze dr Jacka B. Goska stanowiące podstawę postępowania habilitacyjnego przedstawione jest w zbiorze 7. jedno-tematycznych publikacji zebranych pod wspólnym tytułem „*Obliczenia rozkładów natężeń dyfrakcyjnych złożonych struktur politypowych charakteryzujących się jednowymiarowym nieporządkiem*”. Prace publikowane są w języku angielskim, w czasopismach o międzynarodowym zasięgu (z listy filadelfijskiej), przy czym – co należy podkreślić - w 6. z nich dr Gosk jest jedynym autorem a jedna jest dwu-autorska z 80% udziałem dr Goska. Przedstawione prace pochodzą z okresu lat 2000 – 2010 i są cytowane wg bazy *Web of Science* 41 razy. Są wybrane z 40. znajdujących się w dorobku naukowym dr Goska publikacji prezentowanych w międzynarodowych czasopismach i stanowią Jego osobiste osiągnięcie. Pozostałe prace są wynikiem współpracy Habilitanta z wieloosobowymi zespołami naukowymi, głównie eksperymentalnymi, co skutkuje koniecznością dzielenia się niewątpliwie ważnymi, interesującymi wynikami z innymi badaczami. W przypadku badań eksperymentalnych jest to sytuacja oczywista, a zapraszanie dr Goska do zespołów i współautorstwa w publikacjach świadczy o uznaniu jego profesjonalizmu, wiedzy i umiejętności, zarówno w opracowaniach teoretycznych, jak i pracy eksperymentatora.

Do zbioru publikacji dołączony jest 29. stronicowy , napisany w języku polskim i angielskim Autoreferat, w którym poza danymi personalnymi (p.1), posiadanymi stopniami naukowymi (p.2), historią zatrudnienia (p.3) Autor przedstawia przebieg swojej pracy naukowej (p.4) oraz prezentuje w zwięzły sposób tematykę badań, wyniki, które uważa za swoje główne osiągnięcia a także ich odniesienie do wyników innych autorów w obszarze będącym przedmiotem przedstawionych do recenzji prac (p.5) Jest to najobszerniejsza (licząca 20 stron) i wg mnie najważniejsza część tego opracowania. Szkoda, że Autor nie zaopatrzył tej części w krótki „słownik” objaśniający najważniejsze, używane w Autoreferacie i wszystkich publikacjach skróty i symbole. Oszczędziłoby to wiele wysiłku niezbędnego do dobrego zrozumienia prezentowanych osiągnięć czytelnikom takim, jak moja skromna osoba, zwłaszcza, że w prezentowanym temacie w literaturze funkcjonuje wiele różnych konwencji opisu i klasyfikacji struktur nieuporządkowanych. Autoreferat zawiera także omówienie innych osiągnięć naukowo-badawczych dr Goska (p.6) oraz informacje o udziale w konferencjach, pobytach naukowych za granicą, otrzymanych nagrodach i udziale w krajowych i międzynarodowych projektach badawczych (pp.7, 8, 9, 10). Prezentację działalności naukowej dopełnia informacja o pracy Autora jako recenzenta publikacji (p.11), oraz statystyka dotycząca prac własnych (p. 12). Autoreferat kończy krótkie przedstawienie działalności dydaktycznej (p. 13).

Przedstawione w ramach rozprawy habilitacyjnej 7 publikacji spośród opublikowanych 44. dotyczą badania struktur z jednowymiarowym nieporządkiem, charakteryzujących się różnymi rodzajami błędów ułożenia warstw (oznaczanych dalej jako SF-s), pojawiających się w związkach

A^{II}B^{VI}. Habilitant w szczególności analizuje różne politypy takich związków i przejścia fazowe między nimi. Struktury zdefektowane są przedmiotem zainteresowania fizyków od wielu lat, (około połowy 20. wieku), ale ze względu na złożoność problemu do początku lat 2000. zadowalające rozwiązania udało się uzyskać tylko dla stosunkowo prostych przypadków. Aktualnie właśnie struktury z nieporządkiem stają się w coraz większym stopniu interesujące dla współczesnej techniki w wielu obszarach związanych z poszukiwaniem nowych materiałów o zadanych, pożądanym własnościach (np. dla elektroniki, spintroniki, ale także metalurgii czy-ogólnie mówiąc energetyki) a wyjaśnianie zjawisk zachodzących w nich stanowi duże wyzwanie dla teoretyków. Pierwszym krokiem na drodze wyjaśniania związków istniejącego nieporządku z własnościami materiału jest dokładne poznanie tego nieporządku istniejącego w strukturze. Także zbadanie pojawiających się różnych rodzajów defektów i struktur pośrednich w trakcie przemian fazowych zachodzących pod wpływem różnych czynników zewnętrznych pozwala na poznanie mechanizmów tych przemian, co ma znaczenie zarówno czysto poznawcze, jak i aplikacyjne.

Badanie struktury materiałów umożliwia zastosowanie mikroskopów wysokiej rozdzielczości (HREM), ale badanie wnętrza próbki jest możliwe dzięki zastosowaniu metod dyfrakcyjnych (zwykłego i synchrotronowego promieniowania X czy neutronów). Jednak widma dyfrakcyjne otrzymane w wyniku rozpraszania promieniowania na strukturach nieuporządkowanych są skomplikowane i poprawne ich rozszyfrowanie – czyli zidentyfikowanie dokładnej budowy badanego materiału – jest bardzo trudne. Każdy sposób przypisania struktury konkretnemu dyfraktogramowi uzyskanemu eksperymentalnie polega na wyliczeniu w oparciu o teorię dyfrakcji intensywności rozproszonego promieniowania w funkcji kąta rozproszenia i porównaniu wyniku z widmem uzyskanym z eksperymentu, przy założonej tolerancji rozbieżności. Problem w tym, że analityczne formuły są dobrze znane i dają poprawne wyniki w przypadku struktur uporządkowanych. W przypadku struktur nieuporządkowanych analityczne obliczenia są trudne, wymagają budowania różnych szczegółowych modeli zawierających wiele upraszczających założeń. Analityczne obliczenia są wykonywane na ogół dla małej gęstości SF-s, i obecności tylko jednego typu błędów. Otrzymane w wyniku eksperymentu dyfraktogramy są skomplikowane, bogate w wiele istotnych szczegółów – przy rozwijającej się technice pomiarowej coraz lepiej rejestrowanych – więc odpowiedź na postawione przed fizykiem pytanie jaka jest realna, badana struktura jest trudna a często właśnie od niewielkich różnic w stopniu i rodzaju istniejącego w strukturze nieporządku zależą własności materiału. W ten obszar badań wpisuje się cykl prac dr J.B. Goska przedstawiony jako Jego osiągnięcie kwalifikujące do uzyskania stopnia doktora habilitowanego. Zainteresowanie Habilitanta tym tematem jest jak najbardziej uzasadnione a prezentowane wyniki wartościowe. Szkoda, że dr Gosk pozostawił ten temat pięć lat temu – ostatnia praca z przedstawianego cyklu była publikowana w 2010 roku – i dopiero teraz przedstawia swój dorobek naukowy w tym temacie do oceny, jako pretendujący do uzyskania stopnia naukowego doktora habilitowanego.

Istotnym osiągnięciem dr Goska jest zaproponowanie metody obliczania rozkładów natężeń dyfrakcyjnych dla struktur z jednowymiarowym nieporządkiem (ODS) z wykorzystaniem symulacji komputerowych przy użyciu metody Monte Carlo. Zaproponowana metoda daje możliwość obliczania widm dla różnego rodzaju błędów, różnej ich gęstości, różnej odległości między zdefektowanymi warstwami i różnego oddziaływania między nimi, a także przy równoczesnym występowaniu błędów różnego typu w strukturze, czyli współistnienie politypów. Obliczenia prowadzone są przy - jak pisze Autor- powszechnie akceptowanych założeniach, mianowicie: kryształ jest wolny od innych dystorsji, zdolność rozpraszania jest taka sama dla wszystkich płaszczyzn *cp*, nie

ma zmian w odległościach między płaszczyznami i błąd ułożenia dotyczy całej płaszczyzny. Przedstawiona metoda pozwala szczegółowo śledzić wpływ poszczególnych elementów ogólnego modelu na położenie, kształt, szerokość czy intensywność poszczególnych refleksów dyfraktogramu, co daje możliwość dokładnej identyfikacji istniejących w strukturze błędów przy interpretacji wyników eksperymentalnych.

Zaproponowana metoda bazuje na symulacji komputerowej w miejsce trudnych i z konieczności mocno upraszczających realną strukturę metod analitycznych. W zaproponowanej metodzie można wyróżnić dwa elementy. Jednym jest zastosowanie techniki Monte Carlo. Drugim jest zastosowanie do obliczania czynnika strukturalnego rozpraszania idei funkcji częstości $P(j)$ podającej wartości prawdopodobieństw wystąpienia kolejnych błędów ułożenia warstw w odległości j od siebie i zaproponowania postaci tej funkcji zależnej w najogólniejszym przypadku od czterech parametrów- R, α, β, γ . Rozpatrywanie natężeń dyfrakcyjnych z taką funkcją $P(j)$ dr Gosk prezentuje jako *Model 3*. Model ten okazuje się być uogólnieniem różnych, szczególnych przypadków modeli rozpatrywanych analitycznie w literaturze, z których każdy może być uzyskany przy odpowiednim doborze czterech parametrów *Modelu 3* i relacji między tymi parametrami (w szczególności przypadki prezentowane w pracy H1 jako *Model 1* i *Model 2*). Autor przeprowadza dokładną analizę uzyskanych przez siebie wyników i wykazuje przy doborze odpowiednich parametrów ich zgodność z wynikami otrzymanymi przez innych autorów za pomocą obliczeń analitycznych. Należy podkreślić, że dr Gosk przy pomocy opracowanej metody przeprowadza interpretację własnych wyników dyfrakcji rentgenowskiej, przeprowadzonej w celu ustalenia struktury otrzymanych przez siebie monokryształów półprzewodnikowych - roztworów stałych $Zn_{1-x}Cd_xSe$ oraz $ZnSe:Al$ i $ZnS:Cr$. W wyniku tych badań odkrywa politypy: 4H(22), 6H(33), 8H(44), 10H(55) i 3C/DS. Za pomocą metod analitycznych uzyskanie takich informacji o strukturze wychodowanych monokryształów nie byłoby możliwe. Autor porównuje także wyniki swojej metody z możliwościami analizy struktury politypów uzyskiwanych przez innych autorów wykazując ogólność swojego rozwiązania i jego możliwości wykraczające poza dostępne w ramach innych metod (p.5.3 Autoreferatu).

W przedstawionym cyklu prac dr Gosk dyskutuje zarówno przypadkowe, jak i nieprzypadkowe błędy ułożenia warstw w obu strukturach bazowych gęstego upakowania – 3C (o symetrii kubicznej) i 2H (o symetrii heksagonalnej) prowadzące do różnego typu politypów. W pierwszej pracy przedstawianego cyklu [H1] opublikowanej w *Cryst.Res.Technol.* w 2000 roku wyjaśnia w jaki sposób oblicza rozkład natężeń rozproszonego na strukturze promieniowania, czyli widmo dyfrakcyjne, jak wprowadza do swoich komputerowych obliczeń metodę Monte Carlo i definiuje trzy podstawowe modele poprzez określenie odpowiednich funkcji częstości $P(j)$, z podaniem znaczenia użytych w nich parametrów w odniesieniu do opisu zdefektowanej struktury. W tym sensie praca ta jest dla całego cyklu fundamentalna. Wprowadzoną metodę stosuje w niej do zdefektowanych struktur 3C z jednowymiarowym nieporządkiem (ODS), z różnymi typami przypadkowych i nieprzypadkowych błędów ułożenia warstw i różną ich gęstością, różnymi odległościami między zdefektowanymi płaszczyznami, różnym oddziaływaniem między błędami. Dyskutuje także transformacje między różnymi strukturami (np. 3C-4H) i pojawianie się struktur pośrednich a także szczegółowo wpływ zmiany parametrów modelu na kształt widma dyfrakcyjnego, przy czym cenne jest porównanie tego wpływu w każdym z trzech omawianych modeli. W publikacji [H2] dr Gosk przy użyciu swojej metody analizuje struktury z błędami SF-s tworzonymi z wyjściowej struktury 2H, w publikacji [H4] ze struktury 4H a w publikacji [H7] ze struktury 6H. Wszystkie trzy prace opublikowane są w *Cryst.Res.Technol.* odpowiednio w latach 2001, 2003 i 2010. Pozostałe trzy

prace są związane z rozwinięciem prezentacji wyników na trzech konferencjach „*International Conference on Aperiodic Crystals*”, w których dr Gosk uczestniczył (publikowane w recenzowanych czasopiśmie – dwie w *Ferroelectrics*, jedna w *Philosophical Magazine*). Autor prezentuje w nich zastosowanie swojej metody obliczania widm dyfrakcyjnych dla struktur pośrednich pojawiających się przy przemianach fazowych politypów o wysokim okresie – 4H(22) w pracy [H3], 6H i 9R w pracy [H5] i 5T, 8H(44) i 12R(13)₃ w pracy [H6]. Dla każdego z analizowanych przez siebie przypadków dr Gosk prezentuje zestawy widm dyfrakcyjnych dla różnych modeli i różnych parametrów, co może stanowić pewnego rodzaju „bazę danych” dla innych badaczy próbujących zidentyfikować rodzaj SF-s i ich charakter w badanych przez siebie próbkach. Przez porównanie swojego widma z widmami przedstawionymi w pracach dr Goska i poprzez identyfikację charakterystycznych cech można wybrać jako punkt wyjścia konkretny model do dalszej, dokładniejszej analizy. Ważny jest tu fakt, że cechy widm, na których skupia się dr Gosk nie zależą od rodzaju atomów tworzących warstwy, ale od sekwencji ich ułożenia i rodzaju błędów tego ułożenia. Mogą więc służyć pomocą przy analizie struktury różnych zdefektowanych związków, jeśli tylko ich struktura ma charakter gęstego upakowania (*cp*) i spełnia przyjęte przez dr Goska w Jego obliczeniach założenia. Informacja o charakterystycznych cechach widma związanych z odpowiednimi błędami SF-s daje możliwość nie tylko zidentyfikowania pojawienia się konkretnych SF-s w badanej próbce, ale w przypadku, kiedy z niewielkich zmian widma dyfrakcyjnego wnioskujemy się o innych właściwościach materiału (np. o odkształceniach pod wpływem przyłożonego naprężenia) wyodrębnienie efektów związanych z SF-s, które w takich badaniach są przeszkodą zakłócającą informację o właściwościach materiału będących przedmiotem zainteresowania, ma duże znaczenie. Z tego względu wydaje się, że byłoby bardzo pożyteczne opracowanie usystematyzowanego „atlasu” widm dyfrakcyjnych obliczonych przy różnych zestawach parametrów ogólnego *Modelu3* z odniesieniem wartości tych parametrów do konkretnej struktury politypu i istniejących w nim SF-s.

Przedstawione jako osiągnięcie do uzyskania tytułu doktora habilitowanego prace dr Goska stanowią tylko część (mniej niż 20%) Jego działalności naukowej. Pozostałe można rozpatrywać w dwóch grupach – jedna poświęcona głównie badaniom własności magnetycznych związków galu (głównie GaN domieszkowany metalami przejściowymi Mn, Fe, Cr) a także poszukiwanie – zakończone sukcesem w przypadku kryształów GaN:Cr i GaN:Fe – fazy nadprzewodzącej. Druga także związana z własnościami magnetycznymi, ale związków organicznych zawierających poliaryloaminy. We wszystkich Habilitant przedstawia swój udział w wykonywaniu pomiarów magnetycznych i interpretacji otrzymanych wyników. Wszystkie prace z tego obszaru działalności dr Goska są wykonywane w wieloosobowych zespołach – co jest regułą w pracach eksperymentalnych – i ich efektem są wielo-autorskie publikacje. Swój udział w tych publikacjach dr Gosk podaje różny – od 15%, a w niektórych nawet do 80%. Tematyka tych prac jest ciekawa, wciąż będąca przedmiotem zainteresowania zarówno z punktu widzenia zastosowań jak i problemów czysto poznawczych, a otrzymane wyniki są bardzo wartościowe. Świadczy o tym cytowanie ich ponad 500 razy). Rozumiem jednak, że przedstawienie wyników tej działalności naukowej jako osiągnięcia do uzyskania stopnia dr habilitowanego wymagałoby uzgodnienia udziału w tym osiągnięciu z wieloma współautorami. Przedstawione przez dr J.Goska prace dotyczące badania politypów z jednowymiarowym nieporządkiem są –jak już wspominałam na początku recenzji - niewątpliwie Jego osobistym osiągnięciem, o czym świadczą jedno-autorskie publikacje. Uznaję je więc za wystarczające dla ubiegania się o uzyskanie stopnia dr habilitowanego. Jednak działalności poza „tematem habilitacyjnym” nie mogę pominąć, ponieważ świadczy o dużej wiedzy dr Goska jako fizyka, Jego

doświadczeniu jako eksperymentatora, umiejętności prowadzenia badań i uznaniu tych umiejętności w grupie współpracowników. Działalność ta mocno wspiera Jego wniosek świadcząc o Jego dojrzałości jako naukowca. Jako recenzent muszę jednak wspomnieć, że w Jego karierze naukowej brakuje współpracy z ośrodkami zagranicznymi – w ciągu wielu lat swojej pracy naukowej dr Gosk wykazuje tylko jeden tygodniowy pobyt w *Centre des Etudes Atomiques Grenoble*, we Francji w 2009. roku. Uczestniczył za to w wielu (26.) międzynarodowych konferencjach, organizowanych zarówno w Polsce, jak i w różnych krajach na świecie, czym uzupełnia swoje kontakty z naukowcami spoza grona najbliższych współpracowników.

W ocenie działalności naukowej dr J. Goska należy podkreślić Jego dużą aktywność w realizacji projektów naukowych w charakterze zarówno wykonawcy, głównego wykonawcy jak i kierownika. Habilitant przedstawia swój udział w 18. projektach badawczych. Praktycznie przez wszystkie lata swojej pracy naukowej był uczestnikiem jakiegoś projektu naukowego, co wymagało zarówno odpowiedniej wiedzy, jak i umiejętności organizacyjnej.

Do oceny jakości działalności dydaktycznej dr Goska nie czuję się kompetentna. Uznaję, że jako doktor nauk fizycznych zatrudniony na stanowisku adiunkta w Instytucie Fizyki Politechniki Warszawskiej prowadząc zajęcia w Centralnym Laboratorium Fizyki (dodatkowo biorąc udział w modernizowaniu ćwiczeń w tym Laboratorium), Laboratorium II oraz prowadząc ćwiczenia rachunkowe do wykładów z fizyki, na kursach wyrównawczych dla studentów różnych wydziałów Politechniki i kursach przygotowawczych dla kandydatów na studia, wypełniał swoje obowiązki dydaktyczne. Na Uniwersytecie Warszawskim był zatrudniony na stanowisku specjalisty naukowo-technicznego, dydaktyka nie należała więc do Jego obowiązków. W Autoreferacie (p.13) wspomina jednak, że poświęcał czas pomagając studentom wykonującym pomiary w pracowni Zakładu Fizyki Ciała Stałego. Dzielił się więc swoim doświadczeniem eksperymentatora ze studentami czym realizował zadanie jakie mają wszyscy pracownicy naukowci Uniwersytetu. Jest członkiem Komisji do Przeprowadzania Obrony Prac Dyplomowych na Wydziale Fizyki PW.

Reasumując osiągnięcia naukowe dr Jacka Goska można bez wątplenia stwierdzić, że Jego prace przedstawione do recenzji wniosły nowe możliwości do badania złożonych struktur politypowych charakteryzujących się jednowymiarowym nieporządkiem. Są zauważane w środowisku fizyków ciała stałego na świecie (~40 cytowań prac przedstawionych do oceny) i mają szansę dalszych zastosowań. Całokształt Jego osiągnięć naukowych pozwala stwierdzić, że dr Jacek Gosk jest w pełni dojrzałym, samodzielnym badaczem posiadającym duże doświadczenie w planowaniu i prowadzeniu kompleksowych eksperymentów i ich interpretacji. Za osiągnięcia naukowe dwukrotnie otrzymał Indywidualną Nagrodę Rektora Politechniki Warszawskiej - w latach 2011-2012 stopnia pierwszego, w latach 2013 – 2014 stopnia drugiego.

Biorąc pod uwagę całokształt pracy dr J.B Goska – naukowy, organizacyjny i dydaktyczny stwierdzam, że spełnia On wszystkie ustawowe wymagania niezbędne dla uzyskania stopnia doktora habilitowanego i wnoszę o dopuszczenie Go do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

