



Prof. dr hab. Piotr Zieliński  
(+48 12) 662 8204  
[Piotr.Zielinski@ifj.edu.pl](mailto:Piotr.Zielinski@ifj.edu.pl)

Kraków, 22 kwietnia 2023 r.

**Recenzja osiągnięć naukowych dr. Jakuba Narojczyka**

**w postępowaniu w sprawie nadania mu stopnia naukowego doktora habilitowanego**

**A) Osiągnięcie naukowe: cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych**

Wnioskodawca przedstawił 10 publikowanych prac H1 – H10, w tym jedną przyjętą do druku w chwili składania wniosku, a opublikowaną w Physical Review E. Jakub W. Narojczyk, Konstantin V. Tretiakov, Jerzy Smardzewski, and Krzysztof W. Wojciechowski, Phys. Rev. E 108, 045003 – Published 16 October 2023”. Cykl nosi tytuł „Wpływ nanoinkluzji na własności wybranych układów modelowych twardych cząstek”. We wszystkich pracach cyklu Wnioskodawca jest pierwszym autorem, a w ostatniej H10 – jedynym. We wszystkich, poza jedną H4, jest też autorem korespondencyjnym. Największa liczba autorów w tym cyklu wynosi 9. Decydujący wkład Wnioskodawcy w powstanie artykułów cyklu potwierdzają jego własne oświadczenia oraz oświadczenie współautorów. Wkład ten polegał na współautorstwie pomysłów modelowanych układów, wykonanie wszystkich programów komputerowych potrzebnych do ich symulacji, a także skryptów umożliwiających wykonanie obliczeń na klastrach komputerowych dużej mocy. Dziełem Wnioskodawcy są też analizy wyników i ich wizualizacje, które z upływem czasu stają się coraz bardziej syntetyczne i przekonujące, np. przestrzenne przedstawienie kierunków krystalograficznych, w których materiał jest częściowym auksetykiem począwszy od H2, mapy ilorazów Poissona począwszy od H4 i zbiorcze przedstawienie ewolucji własności sprężystych w zależności od wielkości atomów wtrąceń począwszy od H6.

Powiązanie tematyczne artykułów H1 – H10 nie ulega wątpliwości. Wszystkie poświęcone są wyznaczaniu tensora podatności mechanicznej (elastic compliance), będącego odwrotnością tensora stałych sprężystych (modułów sztywności, elastic constants, stiffness moduli) w kryształach o strukturze regularnej ściennie centrowanej (f.c.c.), w których to kryształach



umieszczono rzędy, płaszczyzny, kolumny, jak również kompozycje tych wtrąceń, złożone z atomów różniących się wielkością od atomów kryształów macierzystych. Wybór takich struktur został przekonująco omówiony w autoreferacie. Wyjaśniono tam przewagę struktury f.c.c. nad strukturą heksagonalną najgęstszego upakowania mimo, że obydwie mają nominalnie identyczne współczynniki upakowania.

Oddziaływania międzyatomowe mają postać potencjałów sztywnych kul, a spójność (kohezję) materiałów zapewnia przyłożone ciśnienie zewnętrzne. Symulacje numeryczne wykonywane są metodą Monte Carlo (MC) przy założeniu stałej temperatury. Mamy więc zespół statystyczny  $NpT$ , tj. o określonej liczbie cząstek w stałym ciśnieniu i temperaturze. Elementy tensora podatności sprężystej są obliczane, zgodnie z teorią odpowiedzi liniowej układów wielu ciał, jako średnie po zespole z iloczynów współrzędnych tensora odkształceń, tj. macierze kowariancji tych współrzędnych. Sposób uzyskiwania współrzędnych tensora odkształceń za pomocą macierzy  $h$  jest przypomniany w niemal wszystkich artykułach cyklu, ale co ciekawe, jej definicja sprowadzona jest co najwyżej do sformułowania „formed by vectors defining edges of the box or, more formally, a periodic parallelepiped”. Kontekst wskazuje, że to „tworzenie z wektorów określających krawędzie” polega na budowaniu iloczynów skalarnych, a nie np. diadycznych, tych wektorów. Cała metoda jest wariantem techniki wypracowanej przez M. Parrinello i A. Rahmana, *Strain fluctuations and elastic constants*, J. Chem. Phys. 76, 2662–2666 (1982) a potem udoskonalonej w Instytucie Wnioskodawcy, K. W. Wojciechowski, K. V. Tretiakov, and M. Kowalik *Elastic properties of dense solid phases of hard cyclic pentamers and heptamers in two dimensions*, Phys. Rev. E 67, 036121 (2003), co Wnioskodawca przytacza w ramach piśmiennictwa cytowanego. Wiodącym tematem badań Autora wniosku jest wyznaczenie kierunków krystalograficznych, w których przyłożone naprężenie rozciągające powoduje zwiększenie wymiaru układu, tj. pudła symulacji, przynajmniej w jednym z kierunków poprzecznych. Mamy wówczas do czynienia z częściowym auksetykiem, a odpowiedni iloraz Poissona przyjmuje wartości ujemne. Wyniki wskazują, że kierunki występowania, wzmacniania lub nawet zanikania własności auksetycznych bywają zaskakujące i zapewne trudne do przewidzenia na podstawie heurystycznych rozumowań jakościowych. Jak wspomniano, ilustracje zmian



własności auksetycznych w zależności od geometrii, rozmiaru i wzajemnego usytuowania wtrąceń są bardzo pogładowe i czytelne. Niejako ubocznym wynikiem tych badań są przewidywania dotyczące zmian twardości, tj. odporności na naprężenia normalne i sztywności, tj. odporności na naprężania ścinające, pod wpływem rozważanych wtrąceń, zob. np. H4, rys. 4, H5, rys. 5, H9, rys. 4 i 5 itd. Ciekawym pytaniem jest czy wyniki te można jakoś porównać z utwardzaniem stali i/lub podobnych materiałów poprzez wprowadzanie doń defektów, tym bardziej, że stal austenitowa ma właśnie krystaliczną strukturę regularną ściennie centrowaną. Wskazuje to na perspektywy wykorzystania wypracowanych przez Autora metod w przyszłości. Autor pisze, że wyjściowy model kryształu fcc z oddziaływaniami typu sztywnych kul wykazuje przejście fazowe do stanu ciekłego. To także daje wskazówki dalszego rozwoju badań i, być może, udoskonalania metod symulacji. Chodzi mianowicie o wpływ wtrąceń na parametry topnienia w zależności od ciśnienia, nieliniowe zależności naprężenie-odkształcenie (stress-strain relations) a także możliwość modelowania przejść fazowych typu martensytycznego, tj. bez zachowania relacji grupa-podgrupa, np. fcc  $\rightarrow$  bcc jak to się obserwuje w przejściu austenitu do martensytu w stali. Wydaje się, że obecność wtrąceń płaskich, a być może także i liniowych, może wspomagać lub utrudniać ślizganie się płaszczyzn atomowych przewidziane w koncepcji transformacji Baina i pokrewnych mechanizmów. Ta perspektywiczność wypracowanych metod i osiągniętych wyników w dodatku do dokonanej systematyzacji wpływu rozważanych wtrąceń na własności auksetyczne sprawia, że omawiany cykl prac stanowi wymagany ustawą „znaczny wkład w rozwój określonej dyscypliny”, w tym wypadku fizyki, ale także inżynierii materiałowej, mineralogii i metalurgii. Zwraca uwagę zwięzły, lecz bardzo dobrze zredagowany i odnoszący się do historii badań układów kul, przewodnik po publikacjach cyklu zamieszczony w Autoreferacie.

## **B) Pozostała działalność naukowa**

Poza pracami cyklu omówionego powyżej dr J. W. Narojczyk jest współautorem 9 publikacji wykonanych od roku 2006 do czasu uzyskania stopnia doktora i 28 (wliczając w to prace cyklu) po uzyskaniu tego stopnia do chwili obecnej. Wg strony <https://scholar.google.pl/citations?user=nwYfzCgAAAAJ&hl=pl>, jego prace były cytowane



628 razy, a indeks Hirscha wynosi 17. Przegląd tych prac ukazuje rozwój kompetencji Habilitanta w tworzeniu i posługiwaniu się narzędziami symulacji numerycznych w badaniu faz skondensowanych materii. W okresie przed doktoratem zwraca uwagę algorytm znajdowania minimum energii w układach wielu ciał opisany w pracy J. W. Narojczyk and K. W. Wojciechowski, *Elastic properties of two-dimensional soft polydisperse trimers*, phys. stat. sol. (b) 244, No. 3, 943–954 (2007) oraz metoda elementów skończonych w najczęściej cytowanej pracy T. Stręk, B. Maruszewski, J.W. Narojczyk, K. W. Wojciechowski, *Finite element analysis of auxetic plate deformation*, Journal of Non-Crystalline Solids 354 (35-39), 4475-4480. Tytuły tych artykułów wskazują, że tematem prac są najczęściej materiały o ujemnym ilorazie Poissona badane za pomocą coraz to bardziej zaawansowanych narzędzi numerycznych. Nie jest to jednak jedyny obszar działalności Habilitanta. W jego dorobku znajdujemy np. obliczenia własności mechanicznych nanorurek węglowych za pomocą przystosowanych przez niego do tego celu programów JCrystalSoft, ANSYS® zob. np. F. Scarpa, J W Narojczyk, K W Wojciechowski and D J Inman, *Self-filtering oscillations in carbon nanotube hetero-junctions*, Nanotechnology 22, 465501 (2011). Owocem pobytów w Uniwersytecie du Maine w Le Mans były prace na temat nieuporządkowanych strukturalnie i magnetycznie wybranych związków międzymetalicznych. Wizyta w MTA Centre for Energy Research w Budapeszcie dała początek dłuższej współpracy z profesorem A.M. Imre, który jest współautorem wielu prac Habilitanta. Najdłuższy z zagranicznych staży Kandydata w Uniwersytecie w Bristolu odbył się w ramach koordynowanego przez J. W. Narojczyka grantu MINIATURA i zaowocował długoletnią współpracą z prof. F. Scarpą. Niewątpliwie ciekawym doświadczeniem Wnioskodawcy było uczestnictwo w pomiarze i modelowaniu poruszania się komórek nowotworowych w otrzymanych metodą mokrego wytrawiania, pokrytych złotem kanalikach wyłożonych agarem. Badania te wykryły zdolność przemieszczania się komórek rakowych poprzez długie skoki w dodatku do dyfuzyjnego ruchu znanego dla komórek zdrowych. Do statystycznego opisu tych sposobów przemieszczania użyteczne okazały się rozkłady Lévy'ego z potęgowo zanikającymi „tłustymi ogonami” (fat tails) Sabil Huda et al. ... Jakub W. Narojczyk..., *Lévy-like movement patterns of metastatic cancer cells revealed in microfabricated systems and implicated in vivo* Nature Communications (2018) 9:4539.



Pełny spis nawiązanych i podtrzymywanych współprac międzynarodowych Kandydata znajduje się w jego Autoreferacie. Przekonuje on, że zgodnie z wymaganiami ustawy dr J. W. Narojczyk wykazuje się istotną aktywnością naukową albo artystyczną realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury, w szczególności zagranicznej.

W dawnym systemie stanowisk naukowych stopień doktora habilitowanego wiązał się z funkcją docenta, tj. nauczającego. Dr J. W. Narojczyk ma w tym zakresie doświadczenie jako nauczyciel akademicki w Państwowej Wyższej Szkole Zawodowej im. Prezydenta S. Wojciechowskiego w Kaliszu, gdzie prowadził zajęcia ogólne i specjalistyczne w dziedzinie informatyki, w tym warsztaty międzynarodowe. W swoim Instytucie Fizyki Molekularnej PAN bierze udział w wielu przedsięwzięciach popularyzacyjnych. W latach 2004 – 2019 współorganizował większość międzynarodowych warsztatów i konferencji na temat auksetyków. Organizację niektórych z tych spotkań miałem okazję sam docenić jako ich uczestnik.

### **C) Podsumowanie**

Na podstawie omówionych powyżej dokonań naukowych, dydaktycznych, popularyzatorskich i organizacyjnych dr. J.W. Narojczyka stwierdzam, że jest on dojrzałym pracownikiem nauki, o szerokim, a jednocześnie dobrze wyodrębnionym wachlarzu umiejętności zapewniających mu rozpoznawalność i atrakcyjność jako współpracownika w międzynarodowym środowisku związanym z fizyką obliczeniową faz skondensowanych materii. Wyniki jego prac otwierają interesujące perspektywy dalszych badań. Uważam, że materiały zawarte w jego wniosku habilitacyjnym, a także w dostępnych publikacjach naukowych, pozwalają uznać, dr J.W. Narojczyk spełnia wszystkie wymogi ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* z późniejszymi zmianami (Dz. U. z 2023 r. poz. 742, 1088, 1234, 1672, 1872, 2005, z 2024 r. poz. 124, 227.), w szczególności Art. 219, *Warunki nadania stopnia doktora habilitowanego*. Wnoszę zatem o nadanie dr J.W. Narojczykowi tego stopnia w dziedzinie nauki ścisłe i przyrodnicze, w dyscyplinie nauki fizyczne.

/podpisał: prof. dr hab. Piotr Zieliński/