



Jacek A. Majewski

+48-22-5532924; jacek.majewski@fuw.edu.pl

ul. L. Pasteura 5, 02-093 Warszawa

Warszawa, 03.02.2023r

Ocena dorobku naukowego i osiągnięcia naukowego

Atomistyczne modelowanie obliczeniowe uszkodzeń spowodowanych promieniowaniem w materiałach krystalicznych i amorficznych pracujących w ekstremalnych środowiskach w skali atomowej

dr. Francisco Javier Dominguez-Gutiérrez'a

1. Sylwetka Habilitanta

Dr Francisco Javier Dominguez-Gutiérrez uzyskał tytuł licencjata w zakresie fizyki stosowanej w Uniwersytecie Stanowym Puebla (BUAP) w Meksyku w roku 2008. Następnie w roku 2010 uzyskał tytuł magistra (Master of Science) w zakresie fizyki atomowej i molekularnej w Krajowym Uniwersytecie Meksykańskim (UNAM). W tym samym uniwersytecie (UNAM) uzyskał stopień doktora (PhD) w roku 2015 po przedstawieniu rozprawy doktorskiej *Zderzenia atomów wspomaganie laserem dla zastosowań w syntezie jądrowej* (tytuł rozprawy podany w polskim tłumaczeniu). Po uzyskaniu stopnia doktora rozpoczął niezwykle bogatą międzynarodową karierę badawczą w ośrodkach naukowych o światowej renomie. Od czerwca 2015 do września 2017r był post-doc'iem w Uniwersytecie Stony Brook w Nowym Jorku. Od lutego 2018 do końca lipca 2020 był pracownikiem naukowym Instytutu Maxa Plancka Fizyki Plazmy (*Max Planck Institute for Plasma Physics - IPP*) w Garching k. Monachium. W trakcie zatrudnienia w IPP przez okres trzech miesięcy był stypendystą Fundacji *Alexander von Humboldt* w Uniwersytecie w Helsinkach. Od 1 sierpnia 2020r jest zatrudniony na stanowisku adiunkta w Centrum doskonałości *NOMATEN* Narodowego Centrum Badań Jądrowych (NCBJ). Stanowisko adiunkta w NCBJ Habilitant objął po wygraniu międzynarodowego konkursu. Pięć lat pracy w tak znakomitych ośrodkach badawczych ukształtowało naukowo Habilitanta i umożliwiło nawiązanie współpracy z innymi świetnymi laboratoriami badawczymi.

2. Osiągnięcie naukowe jako podstawa do uzyskania stopnia doktora habilitowanego

Dr Francisco Javier Dominguez Gutiérrez jako podstawę postępowania habilitacyjnego przedstawił do oceny osiągnięcie naukowe zatytułowane *Atomistyczne modelowanie obliczeniowe uszkodzeń spowodowanych promieniowaniem w materiałach krystalicznych i amorficznych pracujących w ekstremalnych środowiskach w skali atomowej* stanowiące zbiór 8 prac opublikowanych w czasopiśmie naukowym o międzynarodowym obiegu (IF w przedziale

1,4 - 6,04). Dwie prace ze zbioru ([1] i [2]) zostały opublikowane w roku 2017 i stanowią dorobek naukowy badań prowadzonych w Uniwersytecie Stony Brook. Pozostałe publikacje pochodzą z lat 2020 ([4] & [5]), 2021 ([3], [7], [8]), oraz 2022 ([6]). Dr F. J. Dominguez-Gutiérrez jest pierwszym autorem 7 publikacji cyklu, w tym jednej publikacji autorskiej, i drugim autorem publikacji w *Computer Physics Communications* ([3]). Motywem przewodnim cyklu są badania teoretyczne wpływu napromieniowania cząstkami na powstawanie defektów (tzw. defektów radiacyjnych) lub deformacji czy odkształceń w krystalicznych i amorficznych metalach. Badania teoretyczne obejmują z jednej strony stworzenie narzędzia numerycznego do analizy danych eksperymentalnych (prace [1] & [2]) cyklu, a z drugiej strony symulacje komputerowe na poziomie atomowym wykorzystujące klasyczną dynamikę molekularną z empirycznym potencjałem pól siłowych (ang. *valence force field, VFF*). W obu tych obszarach dr F. J. Dominguez-Gutiérrez wniósł nowatorski wkład metodologiczny. Prace [1] & [2] z roku 2017 posłużyły jako wytyczne do eksperymentów (przeprowadzonych w *Princeton Plasma Physics Laboratory*). W obszarze dynamiki molekularnej osiągnięciem było opracowanie potencjałów *VFF* w oparciu o metodologię uczenia maszynowego. Bezspornie potencjały *VFF* generowane z zastosowaniem metod uczenia maszynowego znacząco zwiększają dokładność symulacji klasycznej dynamiki molekularnej, a co za tym idzie wiarygodność przewidywań teoretycznych dokonywanych w oparciu o takie obliczenia.

W pracach cyklu, dr F. J. Dominguez-Gutiérrez koncentrował się na zagadnieniu powstawania defektów radiacyjnych i ich dynamiki w metalach stanowiących konstrukcję reaktorów termojądrowych, co oznacza konieczność przeprowadzenia obliczeń dynamiki molekularnej w ekstremalnych temperaturach i ciśnieniu. Wybór prac do cyklu jest całkowicie konsystentny. Prace cyklu zawierają nowatorską metodologię wprowadzoną przez Habilitanta oraz interesujące wyniki symulacji mające praktyczne znaczenie dla szeroko rozumianych problemów reaktorów termojądrowych. W opinii recenzenta, przedstawiony cykl prac stanowi osiągnięcie naukowe w pełni kwalifikujące Habilitanta do nadania stopnia doktora habilitowanego.

3. Dorobek naukowy Habilitanta

Oprócz 8 publikacji cyklu, dr F. J. Dominguez-Gutiérrez jest autorem 26 publikacji z lat 2012 - 2022 (21 publikacji po uzyskaniu stopnia doktora), z czego w 18 publikacjach jest pierwszym autorem. Wszystkie prace zostały opublikowane w dobrych czasopismach, a praca autorów F. J. Dominguez-Gutiérea, P. S. Krstić, S. Irle, and R. Cabrera-Trujillo zatytułowana „Low-energy hydrogen uptake by small cage C_n and $C_{n-1}B$ fullerenes” w bardzo prestiżowym czasopiśmie *Carbon* (IF = 9,59). Jakkolwiek prace cyklu są poświęcone problemowi oddziaływania wysokoenergetycznych cząstek z materią, to w pracach dra F. J. Dominguez-Gutiérea pojawia się problematyka oddziaływania nisko-energetycznych cząstek z materią, świadcząca o poszerzeniu zainteresowań Habilitanta i zbliżeniu do zagadnień chemii kwantowej. Prace opublikowane w czasopismach były cytowane ok.. 190 razy, a H-index autora wynosi 9. Nie jest to oszałamiająca liczba cytowań ponad 30 opublikowanych prac, ale mieści się w ramach wniosków o nadanie stopnia doktora habilitacyjnego

w Polsce. Chciałbym podkreślić, że metodyka stosowana w pracach Habilitanta, jest całkowicie *state-of-the-art* i prace są na wysokim poziomie. Liczba cytowań wynika więc z ograniczonego środowiska zainteresowanego problematyką reakcji w reaktorach termojądrowych, i przypuszczam, że gdyby symulacje dynamiki molekularnej zostały wykonane dla układów ważnych dla nanotechnologii, to liczba cytowań byłaby bez porównania większa.

Dorobek naukowy Habilitanta stanowią wartościowe prace naukowe, w których Habilitant zademonstrował opanowanie współczesnych technik teoretycznych i obliczeniowych stosowanych do badania oddziaływania cząstek z materią, i który znajduje moją pozytywną ocenę. Chciałbym również podkreślić, że *Autoreferat* Habilitanta (jakkolwiek nie podlega ocenie) jest dobrze napisany i świadczy, że Habilitant potrafi krytycznie ocenić swoje badania i przedstawić je na ogólnej platformie badań prowadzonych w dziedzinie, którą się zajmuje.

4. Osiągnięcia dydaktyczne i organizacyjne

Pewne doświadczenie dydaktyczne dr Francisco Javier Dominguez-Gutiérrez zdobył w trakcie studiów doktoranckich w Uniwersytecie UNAM, gdzie prowadził zajęcia z mechaniki kwantowej i fizyki obliczeniowej. Habilitant sprawował też opiekę naukową nad dwoma doktorantami (w NCBJ).

Habilitant brał udział w organizacji dwóch konferencji międzynarodowych i jest aktywnym recenzentem w międzynarodowych czasopismach. Otrzymał szereg nagród, w tym stypendiów (8 przed oraz 8 po otrzymaniu stopnia doktora), co pozwoliło mu na zebranie doświadczeń międzynarodowych.

5. Wniosek końcowy

Podsumowując, uważam, że cykl prac badawczych ([1] - [8]), jak również inne prace Habilitanta, stanowią znaczący wkład w rozwój fizyki materii skondensowanej. Dr Francisco Javier Dominguez-Gutiérrez, specjalizujący się dotychczas w symulacjach dynamiki molekularnej, osiągnął już znaczną dojrzałość naukową i jest świetnie zapowiadającym się młodym naukowcem o dużym potencjale.

Stwierdzam, że dr Francisco Javier Dominguez-Gutiérrez spełnia warunki do uzyskania stopnia doktora habilitowanego określone w ustawie z dnia 20 lipca 2018r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. 2022.574). W związku z tym popieram wniosek o nadanie Habilitantowi stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne.

Z poważaniem



Prof. dr hab. Jacek A. Majewski