

Strategia Priorytetowego Obszaru Badawczego SciMat w latach 2020-2025

Aktualne trendy badawcze i wyzwania w obszarze SciMat

Nigdy wcześniej rozwój cywilizacyjny nie był tak silnie uzależniony od rozwoju nowych technologii, które bazują na dwóch zasadniczych elementach, jakimi są z jednej strony nowe materiały, a z drugiej nowe modele teoretyczne i narzędzia matematyczne wspomagane rozwojem technologii informatycznej i algorytmiki. Poszukiwania i tworzenie nowych materiałów motywowane są potrzebą uzyskania ich specyficznych właściwości, które możemy ogólnie podzielić na fizyczne, chemiczne oraz biologiczne. W odróżnieniu jednak od tego, co miało miejsce jeszcze kilkanaście lat temu, obecne badania nad nowymi materiałami nie mogą być już najczęściej prowadzone w obrębie zamkniętych dziedzin fizyki, chemii czy biologii. To właśnie przymiotnik zaawansowane nawiązuje do tego, że u podstaw tworzenia tej nowej klasy materiałów leży potrzeba połączenia wiedzy oraz odpowiedniej technologii rozwijanej w ramach takich dziedzin jak nanotechnologia, nowe oraz odnawialne źródła energii, elektronika organiczna i molekularna, fotonika, czy biotechnologia.

Postęp prac nad tworzeniem i doświadczalnym badaniem właściwości nowych materiałów idzie w parze z rozwojem ich teoretycznego opisu. Przykładem mogą być tu niedawno odkryte tzw. materiały dirakowskie (w szczególności grafen), w przypadku, których przewidywania teoretyczne znacząco wyprzedziły w czasie realizację doświadczalną. Szybki rozwój wymienionych w poprzednim akapicie dziedzin nie jest możliwy bez wykorzystania najnowszych osiągnięć z szeregu działów matematyki, fizyki matematycznej i fizyki teoretycznej – od teorii układów dynamicznych, metod topologicznych, geometrii różniczkowej i analizy geometrycznej po teorię defektów topologicznych w kwantowej teorii pola. Istotną rolę zaczyna także pełnić teoria kwantowej informacji badająca źródła złożoności obliczeniowej problemów pojawiających się w opisie zaawansowanych, kwantowych materiałów. Prowadzi ona do konstrukcji nowatorskich narzędzi obliczeniowych (takich jak sieci tensorowe), przy użyciu których udało się między innymi wyznaczyć stan podstawowy modelu Hubbarda, czyli najprostszego teoretycznego modelu nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego oraz dzięki którym powstały nowe pakiety obliczeniowe dla chemii kwantowej. Ta sama metoda otwiera także pole dla skutecznego poszukiwania nowych materiałów, których struktura elektronowa posiada porządek topologiczny. Jednym z najnowszych przykładów synergii między metodami matematycznymi a badaniami doświadczalnymi jest wreszcie pomiar niezmienników topologicznych.

O istotności kierunku badań związanych z wykorzystaniem zaawansowanych materiałów świadczy lawinowo rosnąca liczba publikacji w tym obszarze. Przykładem dobrze obrazującym ten proces może być nanotechnologia lokująca się w zakresie swojej podstawowej koncepcji na granicy fizyki, chemii, biologii i zaawansowanych technik obliczeniowych i mająca fundamentalny udział w tworzeniu zaawansowanych materiałów. Podczas gdy w całym okresie lat dziewięćdziesiątych (1990-1999) ukazało się około 470 prac z tej dziedziny, to w ostatniej dekadzie (2010-2019) opublikowano ich już ponad 30 000 (wg bazy Web of Science). Miarą zainteresowania nie jest oczywiście jedynie liczba, ale przede wszystkim jakość i zakres oddziaływania publikacji na środowisko naukowe. W tym aspekcie rewolucyjne zmiany jakie zachodzą w obszarze zaawansowanych materiałów można łatwo prześledzić poprzez *impact factor* (IF) kilku sztandarowych czasopism z obszaru tej tematyki, najlepiej w odniesieniu do najbardziej znanych czasopism takich jak *Nature* (IF = 43,070) oraz *Science* (IF = 41,06). Adekwatnymi przykładami są tutaj *Nature Materials* (IF = 38,887), *Nature Nanotechnology* (IF = 33,407), *Nature Photonics* (IF = 31,583), *Nature Biotechnology* (IF = 31,864), czy powstałe

zaledwie 4 lata temu *Nature Energy* (IF = 54,00). Jak widać, wszystkie te czasopisma mają statystycznie porównywalny wpływ na naukę niż znane wszystkim czasopisma *Science* czy *Nature*. Co więcej, w przypadku zupełnie nowego *Nature Energy* jest on nawet znacznie większy od macierzystego *Nature*, co wydaje się na pierwszy rzut oka niezrozumiałe, ale doskonale obrazuje, jak istotna jest teraz tematyka badawcza odnosząca się do jednego z najistotniejszych wyzwań technologicznych, jakim są zaawansowane materiały do zastosowań w kontekście odnawialnych źródeł energii.

Silne strony UJ w zakresie realizacji projektu SciMat

Warunkiem koniecznym do prowadzenia badań w zakresie zaawansowanych materiałów jest posiadanie odpowiednio nowoczesnej infrastruktury i wysoce wykwalifikowanej kadry naukowej.

- W ciągu ostatniej dekady UJ zbudował nowy kampus dla nauk przyrodniczych i ścisłych (III Kampus UJ) i uzyskał finansowanie szeregu dużych grantów inwestycyjnych (np. projekt ATOMIN o wartości 90 mln zł), które pozwoliły wyposażyć laboratoria badawcze w najwyższej klasy aparaturę naukową i komputerowe klastry obliczeniowe. Ponadto UJ administruje działalnością Narodowego Centrum Promieniowania Synchrotronowego SOLARIS stanowiącego unikatowe w tej części Europy narzędzie badawcze do analizy struktury i własności materiałów.
- Czynnikiem komplementarnym do infrastruktury jest grono kompetentnych naukowców prowadzących badania naukowe na światowym poziomie, umiejących pozyskiwać środki na ich finansowanie. Wszystkie Wydziały zaangażowane w realizację projektu posiadają od 2013 roku kategorię A+. Wysoką klasę badaczy zaangażowanych w projekt potwierdzają ich publikacje w najlepszych periodykach.
- Lokalizacja III Kampusu UJ w sąsiedztwie Parku Technologicznego sprzyja integracji nauki z przemysłem

Słabe strony UJ w zakresie możliwości realizacji projektu SciMat

- W obszarze nauk ścisłych, które leżą u podstaw SciMat, UJ cechuje stosunkowo hermetyczna polityka zatrudnienia z niewielkim odsetkiem grup badawczych wywodzących się z zewnętrznych środowisk badawczych tak światowych jak i krajowych.
- Kolejnym problemem jest struktura wiekowa kadry ze zbyt małą liczbą młodych i dynamicznych badaczy.
- Poważnym ograniczeniem zwiększenia efektywności naukowej pracowników UJ zatrudnionych na wydziałach realizujących badania matematyczno-przyrodnicze jest relatywnie niskie wynagrodzenie w porównaniu do poziomu płac specjalistów funkcjonujących na rynku pracy.
- Kluczowym ogniwem rozwoju naukowego UJ w zakresie nauk ścisłych i przyrodniczych są dobrze przygotowani studenci oraz doktoranci, którzy już od pierwszych lat studiów są zaangażowani w badania naukowe bezpośrednio lub pośrednio związane z realizacją najistotniejszych projektów badawczych w grupie badawczej, z którą współpracują. Takie ścisłe powiązanie studentów i doktorantów z projektami badawczymi jest szczególnie istotne w badaniach nad nowymi materiałami, które w celu optymalizacji parametrów układu wymagają przeprowadzenia dużej ilości prac doświadczalnych, obliczeń numerycznych i analiz teoretycznych. Od wielu lat obserwowany jest spadek

jakości kandydatów na studia pierwszego i drugiego stopnia oraz studia doktoranckie na wydziałach nauk ścisłych i przyrodniczych UJ.

- W naszej ocenie brak jest obecnie zintegrowanego mechanizmu inicjowania i rozwijania współpracy, w tym także współpracy międzynarodowej, na bardzo początkowym etapie jej realizacji, który wymaga finansowania wizyt oraz wstępnych badań projektowych.
- Innym czynnikiem ograniczającym tempo prac badawczych zwłaszcza nad nowymi projektami, które nie mają jeszcze indywidualnego źródła finansowania, jest pokrycie kosztów konserwacji, modernizacji, modyfikacji oraz zakupu aparatury badawczej.

Kierunek i rozwój strategicznych celów projektu SciMat

Podstawowym celem projektu SciMat jest wzmocnienie pozycji UJ na mapie światowej nauki w zakresie badań eksperymentalnych i prac teoretycznych nad zaawansowanymi materiałami na potrzeby między innymi nanotechnologii, chemii zrównoważonego rozwoju, nowych i odnawialnych źródeł energii, fotoniki oraz biotechnologii. Prace eksperymentalne w wyżej wymienionych dziedzinach będą wspierane poprzez nowe metody matematyczne w modelach fizycznych i chemicznych badanych układów. Cel główny projektu zamierzamy osiągnąć poprzez realizację trzech następujących celów szczegółowych:

- rozwój kapitału ludzkiego (w rozumieniu zarówno kadry naukowej jak i studentów) oraz zwiększenie stopnia jego wykorzystania w badaniach nad zaawansowanymi materiałami i metodami obliczeniowymi;
- zwiększenie skuteczności w realizacji badań naukowych zwłaszcza na etapie inicjacji nowych projektów, udziału w konkursach europejskich, zwiększenie liczby publikacji w najlepszych czasopismach
- ułatwienie nawiązywania współpracy naukowej zarówno międzynarodowej jak i lokalnej zwłaszcza na etapie pozyskiwania nowych partnerów, w tym w celu komercjalizacji wyników badań

Priorytetowe domeny badawcze w ramach projektu SciMat

Planowane jest rozwijanie następujących domen badawczych poprzez prace eksperymentalne, symulacje komputerowe i obliczenia teoretyczne:

- 1) Materiały nanostrukturalne** – zakres tej bardzo interdyscyplinarnej domeny badawczej obejmuje zagadnienia związane z wytwarzaniem, analizowaniem i projektowaniem nowych materiałów, których struktura jest kontrolowana na poziomie poniżej 100 nm na potrzeby rozwoju takich dziedzin jak na przykład elektronika molekularna i organiczna, fotonika, sensory, biotechnologia czy medycyna nie wykluczając jednak innych dziedzin, w których takie struktury odgrywają fundamentalną rolę determinując działanie danego układu.

Działania mające na celu wsparcie tej domeny badawczej:

- *Nowa kadra* – przewidywane jest zatrudnienie nowych naukowców (adiunktów i/lub profesorów) bezpośrednio związanych z tą domeną.
- *Program motywacyjny* – przewidywany jest system nagród motywacyjnych dla pracowników naukowych.

- *R2R* – przewidywane są konkursy na mini-granty badawcze dla młodych (doktoranci i asystenci) i doświadczonych naukowców.
- *Strategiczna Infrastruktura #1* – przewidywane są środki na utrzymanie i zakup infrastruktury naukowej.
- *Otwarty dostęp* – możliwość dofinansowania publikacji Open Access.
- *Program Stypendiów Jagiellońskich* – finansowanie pobytu profesora wizytującego.
- *Konferencje i seminaria* – możliwość dofinansowania konferencji naukowych.
- *Fundusz Wyjazdowy* – możliwość dofinansowania krótkoterminowych staży badawczych.
- *Edukacja dla przyszłości* – uruchomienie nowego interdyscyplinarnego kierunku studiów (II stopień) w języku angielskim (*Advanced Materials and Nanotechnology*)
- *Zarządzanie talentami* – program stypendialny dla studentów kierunków *Advanced Materials and Nanotechnology* (II stopień), *Zaawansowane Materiały i Nanotechnologia* (I i II stopień), *Fizyka dla Firm* (I i II stopień), *Chemia* (I i II stopień), *Chemia medyczna* (I i II stopień), *Chemia zrównoważonego rozwoju* (I i II stopień).

2) Materiały związane z wytwarzaniem i gromadzeniem energii – zakres tej interdyscyplinarnej domeny badawczej łączącej badania z zakresu fizyki i chemii będzie związany z badaniami prowadzonymi głównie w zakresie fotowoltaiki, ogniw paliwowych oraz magazynowania energii.

Działania mające na celu wsparcia tej domeny badawczej:

- *Nowa kadra* – przewidywane jest zatrudnienie nowych naukowców (adiunktów i /lub profesorów) bezpośrednio związanych z tą domeną.
- *Program motywacyjny* – przewidywany jest system nagród dla pracowników naukowych.
- *R2R* – przewidywane są konkursy na mini-granty badawcze dla młodych (doktoranci i asystenci) i doświadczonych pracowników.
- *Strategiczna Infrastruktura #1* – przewidywane są środki na utrzymanie i zakup infrastruktury naukowej.
- *Otwarty dostęp* – możliwość dofinansowania publikacji Open Access.
- *Program Stypendiów Jagiellońskich* – finansowanie pobytu profesora wizytującego.
- *Konferencje i seminaria* – możliwość dofinansowania konferencji naukowych.
- *Fundusz Wyjazdowy* – możliwość dofinansowania krótkoterminowych staży badawczych.
- *Edukacja dla przyszłości* – uruchomienie nowej ścieżki studiowania (II stopień kierunku *Chemia*) w języku angielskim: *Chemistry of Materials*.
- *Zarządzanie talentami* – program stypendialny dla studentów kierunków *Chemistry of Materials* (II stopień), *Chemia zrównoważonego rozwoju* (I i II stopień), *Ochrona Środowiska* (I i II stopień).

3) Materiały na potrzeby biotechnologii i medycyny – zakres tej interdyscyplinarnej domeny badawczej łączącej badania z zakresu biofizyki, biotechnologii, biochemii oraz fizyki medycznej i chemii medycznej będzie związany z badaniami prowadzonymi głównie w zakresie biosensorów, inżynierii tkankowej, bio-interfejsów oraz profilaktyki, diagnostyki medycznej i terapii, w tym teranostyki (będącej połączeniem tych ostatnich na poziomie molekularnym), która jest podstawą nowoczesnej medycyny precyzyjnej.

Działania mające na celu wsparcia tej domeny badawczej:

- *Nowa kadra* – przewidywane jest zatrudnienie nowych naukowców (adiunktów i /lub profesorów) bezpośrednio związanych z tą domeną.
- *Program motywacyjny* – przewidywany jest system nagród dla pracowników naukowych.
- *R2R* – przewidywane są konkursy na mini-granty badawcze dla młodych (doktoranci i asystenci) i doświadczonych pracowników.
- *Strategiczna Infrastruktura #1* – przewidywane są środki na utrzymanie i zakup infrastruktury naukowej.
- *Otwarty dostęp* – możliwość dofinansowania publikacji Open Access.
- *Program Stypendiów Jagiellońskich* – finansowanie pobytu profesora wizytującego.
- *Konferencje i seminaria* – możliwość dofinansowania konferencji naukowych.
- *Fundusz Wyjazdowy* – możliwość dofinansowania krótkoterminowych staży badawczych.
- *Zarządzanie talentami* – program stypendialny dla studentów kierunków *Biofizyka* (I i II stopień) oraz *Chemia Medyczna* (I i II stopień)

4) Nowe modele teoretyczne i narzędzia matematyczne wspomagane rozwojem technologii informatycznych i algorytmiki – zakres tej interdyscyplinarnej domeny badawczej, łączącej zagadnienia fizyki i chemii teoretycznej, modelowania molekularnego fizyki matematycznej, matematyki oraz metod numerycznych, będzie rozciągał się od teorii złożonych układów dynamicznych, układów skorelowanych, metod topologicznych, geometrii różniczkowej i analizy geometrycznej po teorię przejść fazowych, defektów topologicznych w kwantowej teorii pola oraz teorię kwantowej informacji, badającą źródła złożoności obliczeniowej problemów pojawiających się w opisie zaawansowanych, kwantowych materiałów, czy przewidywanie i projektowanie *in silico* materiałów i cząsteczek o pożądanych właściwościach.

Działania mające na celu wsparcia tej domeny badawczej:

- *Nowa kadra* – przewidywane jest zatrudnienie nowych naukowców (adiunktów i/lub profesorów) bezpośrednio związanych z tą domeną.
- *Program motywacyjny* – przewidywany jest system nagród dla pracowników naukowych.
- *R2R* – przewidywane są konkursy na mini-granty badawcze dla młodych (doktoranci i asystenci) i doświadczonych pracowników.
- *Otwarty dostęp* – możliwość dofinansowania publikacji Open Access.
- *Program Stypendiów Jagiellońskich* – finansowanie pobytu profesora wizytującego.
- *Konferencje i seminaria* – możliwość dofinansowania konferencji naukowych.
- *Fundusz Wyjazdowy* – możliwość dofinansowanie krótkoterminowych staży badawczych.
- *Zarządzanie talentami* – program stypendialny dla studentów *Fizyka* (I i II stopień), *Chemia* (I i II stopień), *Matematyka* (I i II stopień), *Informatyka* (I i II stopień), *Informatyka Analityczna* (I i II stopień), *Matematyka Komputerowa* (I i II stopień) oraz doktorantów.