

Kraków, 09 grudnia 2022

Recenzja rozprawy doktorskiej pana mgr inż. Izabeli Agaty Domagalskiej
pt.: „Opis z pierwszych zasad molekuly wodoru:
właściwości dynamiczne, statystyczne i interakcja z otoczeniem”

Przedłożona do recenzji rozprawa doktorska pani mgr inż. Izabeli Agaty Domagalskiej, pt. „Opis z pierwszych zasad molekuly wodoru: własności dynamiczne, statystyczne i interakcja z otoczeniem”, została przygotowana w ramach studiów doktoranckich na Uniwersytecie Zielonogórskim. Doktorantka wykonała ją pod kierunkiem promotora dr hab. inż. Artura Durajskiego, prof. Politechniki Częstochowskiej; promotorem pomocniczym był dr inż. Konrad Gruszka.

Dysertacja, opracowana w języku polskim, ma charakter teoretyczny i stanowi monograficzne opracowanie Autorki. Praca liczy łącznie 101 stron, podzielona jest na 4 rozdziały, poprzedzonych (nienumerowanymi): *Streszczeniem* (w języku angielskim oraz polskim) oraz *Wstępem*. Całość zwieńczona jest *Podsumowaniem*, *Bibliografią* (zawierającą 196 pozycji), oraz *Spisem rysunków*.

W przedstawionej rozprawie, przeanalizowane zostały własności fizyczne molekuly dwuatomowej. Choć zagadnienie dotyczy najprostszego przypadku, nie jest zagadnieniem trywialnym. Prezentowane badania mogą być pierwszym krokiem do bardziej zaawansowanych badań układów bardziej złożonych. Zagadnienia te mogą być interesujące w kontekście badań naukowych aktualnie prowadzonych na świecie.

Cel pracy. W moim odczuciu istotnym brakiem prezentowanej rozprawy jest brak sekcji lub paragrafu, definiującego cel prowadzonych badań. W zdefiniowaniu ewentualnego celu pracy, nie pomaga bardzo skromny wstęp na stronie 13 – pozbawiony jest on odnośników literaturowych; dodatkowo opisuje on jedynie treści rozprawy i jest właściwie powtórzeniem streszczenia – ciężko jest zatem umiejscowić badane zagadnienia oraz wagę uzyskanych wyników w szerszym kontekście. Oznacza to, że odbiór rozprawy będzie utrudniony dla czytelników nie zaznajomionych w omawianą tematyka. Ze względów dydaktycznych, wstęp powinien być znacznie dłuższy. Sytuacja poprawia fakt, że każdy rozdział poprzedzony jest obszernym opisem, odgrywającym rolę *wstępu do rozdziału*.



**INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ**

im. Henryka
Niewodniczańskiego

**POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK**

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów

Rozdział pierwszy: opisuje formalizm matematyczny oraz metody numeryczne wykorzystywane w pracy doktorskiej. Autorka podaje zapis hamiltonianu układu elektronowego w ramach drugiej kwantyzacji, opisuje metodę wariacyjną, oraz metodę DFT służącą do modelowania właściwości nanozłącz. Rozdział jest relatywnie krótki; sekcje 1.2 oraz 1.3 zawierają liczne relacje analityczne; co ciekawe sekcja 1.4 opisująca metodę DFT jest wolna od wzorów – stoi to w skrajnej sprzeczności z poprzednimi sekcjami. Czy zatem ta metoda jest pozbawiona podstaw analitycznych? Zakładam, że Autorka przedstawi podstawy analityczne tej metody podczas publicznej obrony.

Treść główna. Rozdział drugi: Dynamika chaotyczna energii stanu molekularnego i całki przeskoju w molekułach dwuatomowych poddanych harmonicznemu wymuszeniu zewnętrznemu. Autorka określa stan podstawowy jonów molekuł dwuatomowych – analizie poddana została ich dynamika. Badania oparte były o metodę wariacyjną. W rozdziale tym podoba mi się umiejętność krytycznego spojrzenia autorki na zastosowane metod (sekcja 2.4). Autorka określiła wartości E_0 i R_0 , odnosząc je do danych literaturowych. Część rysunków trójwymiarowych była trudna w odbiorze; niektóre panele (np. na rys. 2.10) mogły być większe. Brak mi jednak jasnego i stanowczego stwierdzenia, dlaczego parametry E_0 i R_0 są tak istotne (w kontekście wyników uzyskanych przez inne grupy). **Rozdział trzeci:** Własności statystyczne układu molekuł wodoru. Rozdział poprzedzony jest sekcją dot. uwag wstępnych nt. nieekstensywnej fizyki statystycznej. Następnie podany jest zastosowany opis teoretyczny, bazujący na „pełnym” hamiltonianie Hubbarda. Uzyskane parametry zebrane są w postaci dwóch tabel oraz licznych wykresów. Rozdział kończy bardzo krótka dyskusja wyników – brak mi jednak jasnej konkluzji wynikającej z obliczeń. **Rozdział czwarty:** Własności elektronowe mostka wodorowego w nanozłączach wykonanych z platyny, złota oraz miedzi. Rozdział ten wydaje mi się najbardziej ciekawy z prezentowanych, w omawianej rozprawie. Prezentowane obliczenia, przeprowadzane były w ramach formalizmu DFT, z wykorzystaniem Quantum Espresso. Omawiane złącza przedstawione są za pomocą stosownych grafik (rys. 4.2 g-i), zaś wyniki numeryczne przy pomocy stosownych wykresów oraz tabel. Ciekawa jest również sekcja 4.4, zawierająca szereg relacji analitycznych. Niestety, podobnie jak poprzednio, podsumowanie jest dosyć skromne.

Główna część rozprawy opiera się o wyniki, uzyskane numerycznie. Niemniej jednak, rozprawa zawiera liczne zależności analityczne. Brak mi jednak informacji, czy do ich uzyskania zostały wykorzystane programy do obliczeń symbolicznych – proszę o podanie tej informacji w trakcie obrony.



INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ

im. Henryka
Niewodniczańskiego

POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów

Rozprawa przygotowana jest schludnie, a wykresy są czytelne. W rozprawie znalazłem drobne błędy edycyjne, które nie obniżają jednak wartości merytorycznej oraz naukowej prezentowanych wyników. W przypadku prezentowanych danych (niektóre tabele i wykresy) brak informacji nt. ich źródła – czy zostały one zaczerpnięte z opublikowanych prac, czy zostały uzyskane na potrzeby prezentowanej rozprawy.

Przedstawiona rozprawa opiera się na trzech publikacjach (jedna z Physica D, Physica A oraz jedna nieopublikowana w trakcie recenzji w Applied Nanoscience). Dodatkowo, p. mgr inż. Agnieszka Domagalska jest współautorką siedmiu prac wykraczających poza zakres rozprawy (dwie prace w Solid State Communications, po jednej w Beilstein Journal of Nanotechnology, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, Physica C, Acta Physica Polonica A, oraz Phase Transitions). Świadczy to o znacznym zaangażowaniu naukowym Autorki.

Podsumowując, w recenzowanej rozprawie p. mgr inż. Izabela Agata Domagalska przedstawiła oryginalne rozwiązanie problemu naukowego, udokumentowane artykułami naukowymi. Rozprawa spełnia zatem ustawowe kryteria stawiane rozprawom doktorskim, w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauk fizycznych. W związku z powyższych wnoszę o dopuszczenie pani mgr. inż. Izabeli Agaty Domagalskiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



**INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ**

**im. Henryka
Niewodniczańskiego**

**POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK**

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptak,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów