

Dr hab. Michał Piasecki
Katedra Fizyki Teoretycznej
Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych
Uniwersytet Humanistyczno-Przyrodniczy im. Jana Długosza w Częstochowie
al. Armii Krajowej 13/15, 42-200 Częstochowa

Recenzja

rozprawy doktorskiej Pani mgr Izabeli Agaty Domagalskiej

*Opis z pierwszych zasad molekuly wodoru: właściwości dynamiczne, statystyczne
i interakcja z otoczeniem*

wykonanej w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Zielonogórskiego, pod kierunkiem
dr hab. inż. Artura Durajskiego, Profesora Politechniki Częstochowskiej
oraz dr inż. Konrada Gruszka- Promotora pomocniczego.

Wybór tematyki badawczej

Przedmiotem niniejszej recenzji jest praca doktorska Pani mgr Izabeli Agaty Domagalskiej pt. *Opis z pierwszych zasad molekuly wodoru: właściwości dynamiczne, statystyczne i interakcja z otoczeniem*, w której przedstawione zostały wyniki badań szeregu właściwości fizycznych (dynamiczne, statystyczne oraz interakcji z otoczeniem) dla molekuł dwuatomowych.

Badania struktury najprostszych cząsteczek są niezwykle istotne dla badań podstawowych, ponieważ ich struktura może być wyliczona z zasad pierwszych, co w odniesieniu do niezwykle precyzyjnych eksperymentów, pozwala na weryfikację założeń mechaniki i elektrodynamiki kwantowej wykorzystywanych do opisu własności molekuł. Cząsteczka H_2 oraz jon H_2^+ (oraz grupa molekuł X_2 , X_2^+ i XY^+ , gdzie X oraz Y to jony związane poprzez jeden elektron) głównie ze względu na swoją prostotę, są także wykorzystywane jako narzędzie do weryfikacji fundamentów współczesnej fizyki: elektrodynamiki kwantowej, wartości stałych fizycznych, czy poszukiwania nowego typu oddziaływań. Kolejnym zagadnieniem, jest możliwość określenia granic stosowalności powszechnie stosowanych modeli i przybliżeń dla opisu własności cząsteczki typu H_2 .

Z drugiej strony szersze i bardziej dokładne zbadanie struktury i własności molekularnego wodoru pozwoli na wykorzystanie tej wiedzy dla zwiększenia możliwości potencjalnych zastosowań np. pozyskiwanie ekologicznego paliwa czy też wyjaśnienia własności nadprzewodzących wodoru i jego związków. Zasadniczym ograniczeniem eksperymentów dotyczących molekuly wodoru jest bardzo słabe jej oddziaływanie z polami elektromagnetycznymi, w tym także z promieniowaniem laserowym. Z tej przyczyny, postęp w badaniach eksperymentalnych jest powolny, głównie ze względu na poszukiwanie efektywnych metod badawczych poprzez wielokrotne próby i kolejne udoskonalania układów pomiarowych. Dlatego, badania teoretyczne oddziaływań cząsteczek dwuatomowych z otoczeniem nie tylko mogą dać impuls dla przeprowadzenia nowych eksperymentów a także mogą pomóc wyjaśnić i zinterpretować dotychczas uzyskane wyniki. Niestety, powszechnie stosowane modele teoretyczne i odpowiednie procedury numeryczne są czasochłonne oraz wymagają zaangażowania dużych mocy obliczeniowych dla osiągnięcia wymaganej dokładności, (w szczególności - dla wydawałoby się niewiele bardziej skomplikowanych układów molekularnych typu XX, XY czy też ich jonów), a nawet mogą błędnie przewidywać ich właściwości. Z tego powodu, niezbędne jest opracowanie i przetestowanie nowych, bardziej dokładnych i efektywnych teoretycznych metod badania struktury elektronowej oraz jej dynamiki, własności statystycznych grupy tych molekuł w celu uzyskania jeszcze lepszej wiedzy o charakterze wiązań pomiędzy poszczególnymi atomami, własnościach chemicznych, optycznych i reaktywności cząsteczek. Biorąc pod uwagę powyższe rozważania, nie ma wątpliwości, że tematyka podjęta przez Doktorantkę jest aktualna, co potwierdza zarówno duża liczba publikacji dotyczących tej tematyki oraz wybory gremiów przyznających najbardziej prestiżowe granty.

Ocena formalna i merytoryczna rozprawy

Recenzowana praca zawiera opis dorobku naukowego Autorki rozprawy podzielony na części zawierające 3 publikacje ściśle związane z dysertacją i pozostałe (7), wszystkie indeksowane w *Journal Citation Report*, streszczenie w języku polskim i angielskim, krótki wstęp, cztery rozdziały (pierwszy, gdzie Autorka przedstawia formalizm matematyczny, w ramach którego zostały przeprowadzone obliczenia, trzy pozostałe zawierają wyniki własne), Podsumowanie, Bibliografię – 196 pozycji oraz Spis rysunków (19). Łącznie 94 strony. Należy podkreślić, że materiał zawarty w dysertacji został w znacznej części opublikowany w trzech artykułach

(Physica D: Nonlinear Phenomena, If=3.751, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications IF=3.778, Applied Nanoscience IF=4.288). W pierwszej i trzeciej publikacji mgr Domagalska jest pierwszym autorem co zwyczajowo wskazuje na jej dominujący wkład w pracę. Dlatego chciałbym uzyskać informację jaki był jej udział w powstanie publikacji drugiej (Physica A), gdzie jest trzecim w kolejności współautorem.

Znacząca część z wyników umieszczonych w pracy, jak już wspomniałem powyżej, została wcześniej opublikowana w specjalistycznych czasopismach o istotnym współczynniku wpływu, a więc prezentowane wyniki zostały pozytywnie ocenione przez niezależnych recenzentów. Ponieważ moim obowiązkiem jest kompleksowa ewaluacja dysertacji swoje uwagi przedstawię w dalszej części, które posłużą jako zagadnienia do dyskusji podczas obrony pracy doktorskiej.

Zasadniczą część dysertacji powinien rozpocząć Wstęp, którego zawartość jest istotna z punktu przedstawienia motywacji, powiązania przeprowadzonych badań z wybraną dyscypliną (nauki fizyczne) i klarownego sformułowania problemu badawczego, zwłaszcza że z tytułu rozprawy trudno jest określić co może być uznane za element nowości. Niestety, Wstęp jest bardzo ogólnikowy; ma formę rozszerzonego abstraktu. Brak jest jakiegokolwiek odnośnika dotyczącego aktualnego stanu wiedzy dotyczącego zakresu badań będących przedmiotem dysertacji. To, bez starannego przeczytania pełnego tekstu rozprawy doktorskiej nie daje możliwości oceny nowatorstwa osiągnięć Autora. Część tych informacji zawiera rozdział I, zaś reszta jest rozproszona w uwagach wstępnych zawartych w rozdziałach II-IV. Takie podejście w istotny sposób zaburza spójność dysertacji, jest uciążliwe dla potencjalnego czytelnika i niestety często występuje pracach, gdzie poszczególne rozdziały są oparte na publikacjach.

Pani mgr Domagalska stworzyła pakiety obliczeniowe, które wykorzystwała do obliczeń:

„Odpowiednie oprogramowanie dostosowane do przypadku molekuły dwuatomowej napisałam samodzielnie w pakiecie Wolfram Mathematica 10. W szczególności opracowałam sześć pakietów o nazwach Gauss01 - Gauss03 oraz Slater01 - Slater 03.” W związku z powyższym mam dwa pytania:

- Czy i w jaki sposób wykonano walidację w/w pakietów?
- Czy są one dostępne dla zainteresowanych podobnymi badaniami?

Kolejne podrozdziały rozprawy doktorskiej zawierają wyniki badań tworzących logiczną całość i dotyczących:

- Dynamiki chaotycznej energii stanu molekularnego i całki przeskoku w jednokrotnie zjonizowanych molekułach dwuatomowych typu X^+_2 i XY^+ , poddanych harmonicznemu wymuszeniu zewnętrznemu (Rozdział II);
- Obliczeń w ramach formalizmu nieekstensywnej statystyki Tsallisa w celu określenia właściwości statystycznych (entropia, energia wewnętrzna oraz ciepło właściwe) dla układu złożonego z $M \geq 3$ molekuł wodoru (Rozdział III);
- Właściwości elektronowych mostka wodorowego w nano-złączach wykonanych z platyny, złota oraz miedzi (Rozdział IV)

Za najbardziej istotne i nowatorskie osiągnięcia Doktorantki uzyskane w trakcie realizacji powyżej wymienionych problemów badawczych będących elementami recenzowanej dysertacji uważam:

1. Wykazanie, że przepływ elektronów przez nano-złącze skradające się z mostka wodorowego H_2 i kotwic metalowych wykonanych z platyny, złota lub miedzi może prowadzić do zmniejszenia liczby dozwolonych stanów elektronowych w mostku wodorowym. Konsekwencją zmniejszenia ilości stanów elektronowych w mostku może prowadzić do zmniejszenia liczby kanałów odpowiedzialnych za transfer elektronów, co powoduje zmniejszenia przewodnictwa złącza.
2. Wyniki badań Autorki dotyczących oddziaływania molekuly z otoczeniem poprzez wymuszenie harmoniczne przy wykorzystaniu jako układów testowych jednokrotnie zjonizowanych molekuł dwuatomowych typu H^+_2 oraz LiH^+ , których efektem są następujące wnioski:
 - dla odpowiednio dobranego wymuszenia zaobserwowano pojawienie się chaotycznych zmian odległości między rdzeniowych, w szczególności przy niskich częstościach wymuszenia.
 - zmiana rozkładu ładunkowego rdzeni kationów czy masy rozważanych rdzeni nie wpływa jakościowo na wartość wykładników Lapunowa w przestrzeni parametrów takich jak amplituda oraz częstość wymuszenia.

Poza Wstępem, do którego formy mam zastrzeżenia edytorskie, pozostałe części rozprawy napisane są poprawnie. Jednak Doktorantka nie ustrzegła się drobnych błędów edycyjnych i językowych (*np. we wstępie jest informacja o 192 pozycjach literatury a w rzeczywistości jest*

ich 196; Rozdział I: jawne **wyróżnienia** analityczne dla całek; prawidłowa gęstość stanu podstawowego; zachowania magnetycznego i elektronowego; itp.), często mające swe źródło w tłumaczeniu pojęć fizycznych na język polski. Te drobne przeoczenia, oczywiście nie wpływają na moją wysoką ocenę pracy. Z drugiej strony, muszę podkreślić, że dysertacja zawiera bardzo dobrze przygotowane wykresy i tabele zarówno pod względem technicznym jak i kolorystycznym, które znacząco ułatwiają analizę porównawczą, podnoszą walory pracy i przyczyniają się do przejrzystego wyjaśnienia skomplikowanych zagadnień. Użycie przez Autorkę zaawansowanego edytora tekstu powoduje, że formuły i wzory matematyczne są wyjątkowo czytelne i dobrej jakości co jest istotne w raportowaniu badań teoretycznych. Przetawiona do oceny rozprawa doktorska stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego, potwierdzając wiedzę oraz umiejętność samodzielnego prowadzenia badań naukowych przez Doktorantkę, zaś podjęta tematyka jest aktualna i ma potencjał aplikacyjny (w szczególności wyniki badań przedstawione w Rozdziale IV). Należy podkreślić, że Pani mgr Domagalska jest współautorką dziesięciu artykułów w czasopiśmie indeksowanym w Journal Citation Reports.

Tym samym uważam, że rozprawa doktorska spełnia ustawowe wymagania stawiane kandydatom do stopnia doktora, określone ustawą o stopniach i tytułach naukowych – uwzględnione w art. 13 ust. 1 Ustawy z dnia 14 marca 2003 roku o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki w związku z art. 179 Ustawy z dnia 3 lipca 2018 r. Przepisy wprowadzające ustawę - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2018 r., poz. 1669).

Na tej podstawie wnioskuję do Komisji powołanej przez Senat Uniwersytetu Zielonogórskiego o dopuszczenie Pani mgr Izabeli Agaty Domagalskiej do kolejnych etapów postępowania w procedurze dotyczącej nadania stopnia doktora w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne.

Michał Piasecki