

Ocena rozprawy doktorskiej mgr Violetty Raczyńskiej pod tytułem

“Badanie własności warstw ciekłokrystalicznych wybranych cyjanobifenyli na powierzchniach nanostruktur węgla i azotku boru metodą symulacji komputerowych.”

Rozprawa napisana jest w języku polskim. Terminologia naukowa jest poprawna, a język prosty, precyzyjny i zrozumiały. Zauważyłem tylko kilka drobnych błędów, usterek i niezręczności. Oto wybrane losowo przykłady: na str. 13: „jest on [moment dipolowy] mierzony w Debayach” (powinno być „w debajach”). Na stronie 27 pozostał „odsystemowy” komunikat [WSTAWIĆ RYSUNEK] (którego zresztą nie wstawiono). W pracy Autorka mówi o własnościach rozważanych układów, podczas gdy odpowiednim słowem jest „właściwość”. Ilustracje są czytelne, choć niekiedy czcionka opisów jest zbyt mała. Ponadto opisy niektórych rysunków są po angielsku, zapewne z powodu wykorzystania ilustracji, przygotowanych do publikacji anglojęzycznej.

Pracę doktorską pani mgr Violetty Raczyńskiej otwiera wstęp, w którym Autorka uzasadnia wybór tematyki badań, związanej w ogólności z wykorzystaniem pól elektrycznych do prowadzenia strumienia promieniowania spolaryzowanego. W tym celu wykorzystuje się kryształy ciekłe, m.in. zbudowane z cyjanobifenyli, osadzone na odpowiednim podłożu. Wybór Autorki padł na ciekłe kryształy nCB, osadzone na grafenie, heksagonalnym borku azotu i układzie nanorurek węglowych.

Badane materiały opisano dokładniej w rozdziale 2. Zwrócono uwagę na ich ciekłokrystaliczność, związaną z uporządkowaniem orientacyjnym silnie

anizotropowych molekuł. Punkt 2.2 omawia rozważane substraty niepolarne – alotropowe odmiany węgla (nanorurki węglowe i grafen) i polarny - heksagonalny azotek boru. W dalszej kolejności (punkt 2.3) następuje przegląd symulacji ciekłych kryształów w ograniczonej objętości. Autorka przytacza wyniki własnych badań: zależność właściwości n-cyjanobifenylu od parzystej lub nieparzystej liczby atomów węgla w ogonie węglowodorowym tych molekuł – efekt widoczny zwłaszcza dla podłoża niepolarnych. Podłoże polarne ma inny wpływ – zmniejszenie przenikalności dielektrycznej.

W rozdziale 3 opisana jest metodologia symulacji komputerowych, użytych w ramach badań objętych rozprawą doktorską. Symulacje prowadzono z wykorzystaniem gotowych, ogólnie dostępnych programów i znanych z literatury parametryzacji oddziaływań międzyatomowych. Krótka historia symulacji komputerowych i opis ich zalet, przytoczone równania ruchu Lagrange’a, Newtona i Hamiltona oraz algorytm Verleta są powszechnie znane i nic nie wnoszą do rozprawy. Natomiast istotna jest specyfikacja termostatu i zastosowanego pola siłowego. Kolejny podrozdział podaje model molekuly z grupy nCB, używany w przeprowadzonych symulacjach. Grupy CH_n, n = 1,2,3, modelowane były jako sferyczno-symetryczne miejsca oddziaływań. Podłoża były sztywne, co może istotnie wpływać na wyniki. Czy Autorka prowadziła symulacje z elastycznym podłożem? Wydaje się, że nie sprawiałoby to dodatkowych trudności.

Rozdział 4 opisuje konfiguracje początkowe badanych układów. Symulacje zostały przeprowadzone w obszarze międzyfazowym mezogen-substrat dla układu warstwy ciekłokrystalicznej, zamkniętej pomiędzy sztywnym substratem. Wybór parametrów konfiguracji początkowych jest słabo uzasadniony. Jakie kryteria wyboru stosowała Autorka?

Dyskusja wyników obliczeń stanowi rozdział 5. Metody „oglądania” wyników są standardowe i niezbyt głębokie. Zwłaszcza omówienie parametru porządku jest bardzo pobieżne. Na wykresie 5.6 nie podano jednostek.

Praca wnosi pewne spostrzeżenia i kładzie podwaliny pod przyszłe badania zarówno teoretyczne (symulacyjne), jak i eksperymentalne, prowadzące do bardziej praktycznych, zorientowanych na zastosowania, kontekstach.

Podsumowując, praca jest wartościowa i mimo że dotyczy raczej niszowego zagadnienia, a liczba wyników i jakość ich analizy nie jest imponująca, to wnosi wkład w badanie warstw ciekłokrystalicznych na powierzchniach różnych substratów.

Pani Violetta Raczyńska jest współautorką 11 prac, opublikowanych w czasopismach o zasięgu międzynarodowym. Trzy z nich uwzględniono w bazie Web of Science. Z tematyką rozprawy wiąże się bezpośrednio 6 publikacji.

W konkluzji oceny stwierdzam, że przedłożona praca pt. **„Badanie własności warstw ciekłokrystalicznych wybranych cyjanobifenyli na powierzchniach nanostruktur węgla i azotku boru metodą symulacji komputerowych”** spełnia wymagania, stawiane przez obowiązującą ustawę pracom na stopień doktora i wnoszę o dopuszczenie mgr Violetty Raczyńskiej do dalszego toku przewodu doktorskiego.

