

Toruń, dn. 04.09.2025r.

prof. dr hab. Ireneusz Grabowski
Instytut Fizyki UMK
ul. Grudziądzka 5/7
87-100 Toruń
tel. (48) (56) 6113317
ig@fizyka.umk.pl

Recenzja rozprawy doktorskiej mgra Grzegorza Skrzyńskiego zatytułowanej „*Wieloreferencyjna metoda sprzężonych klasterów w zastosowaniu do opisu procesów dysocjacji wybranych dwuatomowych połączeń metali alkalicznych oraz ziem alkalicznych*”

Oceniana rozprawa napisana została pod kierunkiem prof. dr hab. Moniki Musiał w Instytucie Chemii na Wydziale Nauk Ścisłych i Technicznych Uniwersytetu Śląskiego. Praca doktorska przedstawia wyniki badań teoretycznych opisu procesu dysocjacji czterech układów dwuatomowych złożonych z metali alkalicznych i metali ziem alkalicznych tzn. neutralnego dimeru litu i rubidu ($LiRb$) jego kationu molekularnego ($LiRb^+$), a także kationów molekularnych będących połączeniem magnezu z litem oraz sodem ($LiMg^+$ i $NaMg^+$). Obliczenia pozwalające na wyznaczenie krzywych energii potencjalnej wykonano przy użyciu zaawansowanych metod *ab initio* a w szczególności jednoreferencyjnych wariantów metody sprzężonych klasterów (CC) oraz walencyjno-universalnej wieloreferencyjnej metody sprzężonych klasterów częściej znanej w literaturze jako Fock-Space Coupled Cluster (FS-CC) w wersji z hamiltonianem pośrednim IH-FS-CC. Dla badanych układów wyznaczono dokładne krzywe energii potencjalnej i stałe spektroskopowe dla stosunkowo dużej liczby stanów elektronowych z uwzględnieniem korelacji wszystkich elektronów i co ważne bez użycia pseudopotencjałów. Warto podkreślić, że to pierwsze w literaturze tego typu obliczenia. Dodatkowo w badaniach uwzględniono wpływ efektów relatywistycznych na wartości obliczonych stałych spektroskopowych wykorzystując skalarną poprawkę relatywistyczną trzeciego rzędu Douglasa-Krolla (DK3). Badane w pracy zagadnienie komplikuje konieczność opisu dysocjacji układów zamkniętopowłokowych na układy otwartopowłokowe. Jest to niezmiernie zaawansowane metodologicznie zadanie, co jeszcze bardziej wpływa na to, że obliczenia są numerycznie bardzo wymagające i bardzo złożone. Należy podkreślić, że doktorant poradził sobie z badanym problemem



bardzo dobrze, prezentując nie tylko szeroką wiedzę, umiejętność analitycznego myślenia ale przede wszystkim systematyczne podejście i efektywną analizę otrzymanych wyników.

Rozprawa doktorska mgra Grzegorza Skrzyńskiego napisana została w języku polskim i liczy ponad 160 stron, z czego ponad 40 stron to wyniki obliczeń (całkowite wartości energii badanych kationów molekularnych) zebrane w tabelach w Suplemencie. Prezentowana literatura jest bardzo obszerna, aktualna i bardzo dobrze dobrana do prezentowanych zagadnień.

Praca rozpoczyna się krótkim wprowadzeniem do tematyki badań, uzasadniającym zarówno podjęcie badań jak i wybór odpowiednich narzędzi teoretycznych. We wprowadzeniu prezentowane są też możliwe wykorzystania aplikacyjne wyników badań. We wstępie sprecyzowano też cel badań i ich zakres oraz uzasadniono znaczenie badawcze molekuł i kationów molekularnych złożonych z metali pierwszej i drugiej grupy układu okresowego. Dalsza część to rozdział zawierający opis podstawowych metod wykorzystywanych w pracy, przyjętą metodologię badań oraz podstawowe definicje i pojęcia niezbędne do zrozumienia prezentowanych w dalszej części obliczeń i wyników. Przedstawiono w niej dosyć szczegółowo wykorzystywane (HF, CC, IH-FS_CC), rodzaje i znaczenie baz funkcyjnych, znaczenie korelacji elektronowej dla jakości opisu a także konieczność wykorzystania formalizmu hamiltonianu pośredniego.

Rozdział kolejny „Wyniki badań” to przedstawienie szczegółów obliczeniowych i analiza wyników otrzymanych w trakcie prac nad doktoratem. Jest to najbardziej obszerny i wartościowy element pracy. Opisano w nim etapy badań, dobór metod, baz funkcyjnych, sposób przeprowadzenia obliczeń. W rozdziale tym szczegółowo omówiono kolejno rezultaty dla: kationu molekularnego LiRb^+ , molekuly LiRb , kationu molekularnego LiMg^+ oraz NaMg^+ przedstawiając i analizując wyniki dla stanu podstawowego oraz stanów wzbudzonych. Krzywe energii potencjalnej zaprezentowano w postaci rysunków a stałe spektroskopowe w formie tabel. Przedstawiono też wnikliwą analizę otrzymanych wyników oraz ich porównanie, gdzie to było możliwe, z danymi literaturowymi. Należy podkreślić, że opis wyników i ich analiza jest bardzo szczegółowa i dogłębna. Zarówno sposób przeprowadzania obliczeń dla kolejnych układów jak i ich prezentacja w pracy jest systematyczna i powtarzalna. Jeszcze raz chcę podkreślić, że przyjęta w pracy metodologia i sposób przeprowadzenia obliczeń, prezentacji i analizy wyników jest poprawny pod względem merytorycznym i jakościowo bardzo wartościowy. Imponujący jest też wysiłek włożony w przygotowanie i wykonanie obliczeń a także szczegółową analizę rezultatów.

Pracę wieńczy podsumowanie pozwalające całościowo spojrzeć na najważniejsze elementy i wyniki pracy doktorskiej a także potencjalne zastosowanie uzyskanych wyników. Uzyskane w niniejszej rozprawie krzywe energii potencjalnej są kluczowe dla kompletnego planowania badań eksperymentalnych opisywanych w pracy układów w warunkach ultrazimnych.

Od strony technicznej, językowej i co najważniejsze merytorycznej praca napisana jest w sposób zadowalający. Opis metod i prezentacja wyników jest na bardzo wysokim poziomie.

W podsumowaniu pragnę stwierdzić, iż recenzowaną rozprawę doktorską mgra Grzegorza Skrzyńskiego oceniam bardzo pozytywnie. Podjęty przez doktoranta program badawczy dotyczy ważnej tematyki o dużym znaczeniu poznawczym i możliwościach aplikacyjnych w planowaniu eksperymentu. Mgr Grzegorz Skrzyński wykazał się dużą wiedzą ogólną oraz biegłością w wykorzystaniu zaawansowanych narzędzi teoretycznych, w tym programów komputerowych, oraz przeprowadzania wnikliwej analizy i opracowania otrzymanych wyników. Świadczy to o umiejętności doktorantki do efektywnego prowadzenia pracy naukowej.

W mojej ocenie ilość i jakość otrzymanych wyników (częściowo już opublikowanych w renomowanych czasopismach) w zupełności spełnia wymagania stawiane rozprawom doktorskim. Nie mam więc wątpliwości, że rozprawa mgra Grzegorza Skrzyńskiego spełnia warunki i wymagania stawiane rozprawom doktorskim i wnoszę o dopuszczenie mgra Grzegorza Skrzyńskiego do kolejnych etapów przewodu doktorskiego.

Ze względu na wagę rozwiązanego problemu, zaawansowanie metodologiczne badań, możliwości aplikacyjne oraz unikatowość otrzymanych rezultatów a także systematykę badań i bardzo dobrze przeprowadzoną analizę uzyskanych wyników wnioskuję o wyróżnienie rozprawy doktorskiej mgra Grzegorza Skrzyńskiego.

Ireneusz Grabowski

A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'I. Grabowski', with a stylized, cursive script.