



Politechnika Łódzka

Instytut Techniki Radiacyjnej

Profesor dr hab. inż. Piotr Paneth

## RECENZJA

**rozprawy doktorskiej mgr Anny Spyszkiewicz  
z tytułowanej**

***Dokładne wyznaczanie własności atomu helu i cząsteczki wodoru z  
wykorzystaniem funkcji jawnie skorelowanych***

Rozprawa doktorska mgr Spyszkiewicz została oparta na badaniach wykonanych w ramach interdyscyplinarnych studiów doktoranckich HighChem Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza, w Zakładzie Chemii Kwantowej Wydziału Chemii. Zaprezentowane w rozprawie badania były wsparte dwoma grantami Narodowego Centrum Nauki. Promotorem pracy jest dr hab. Mariusz Puchalski, prof. UAM, naukowiec o uznanym autorytecie w zakresie chemii kwantowej, ze szczególnym ukierunkowaniem na obliczenia o wysokiej precyzji. Recenzowana praca wpasowuje się doskonale w ogólny nurt badań prowadzonych w Zakładzie. Aktualne możliwości pomiarowe pozwalają na wyznaczenie wielu właściwości (a nie własności jak umieszczono w tytule rozprawy) układów atomowych i molekularnych na niespotykanym poziomie dokładności. Prace obliczeniowe prowadzone w zespole prof. Puchalskiego pozwalają na dostarczenie wyjaśnienia teoretycznego nawet niezwykle małych zmian energetycznych (rzędu  $10^{-7}$  kcal/mol) a często wskazanie błędów w eksperymencie o czym wspomina Doktorantka w kilku częściach swojej pracy (patrz również Adv. Quant. Chem. 87, 2023, 1-36). Stąd przedstawiona mi do recenzji rozprawa niewątpliwie wpisuje się w bardzo aktualny nurt badawczy, do którego wnosi nowe informacje. Została ona oparta na 3 artykułach naukowych, które ukazały się w dobrych czasopismach o światowym obiegu stanowiących topowe pisma w zakresie fizyki kwantowej (czego niestety nie odzwierciedlają ich współczynniki oddziaływania ze względu na wąski krąg naukowców zajmujących się tak wysublimowaną tematyką).

Zwięzła część wstępna jest do pewnego stopnia mieszaniną wprowadzenia czytelnika do zagadnień, którymi zajmowała się Doktorantka a określeniem celu badań. Dla niewprawnego w tematyce czytelnika (do jakich zalicza się ten recenzent) klarowniejsze wydzielenie celu pracy już na początku bardzo ułatwiłoby czytanie rozprawy. Tym bardziej, że kolejny rozdział stanowi z jednej strony opis podstaw teorii stosowanej w badaniach a z drugiej jednocześnie opis wyników. Jak rozumiem, Doktorantka wykonała też części modyfikacji programów obliczeniowych co wskazuje na umiejętności nie tylko z zakresu chemii kwantowej ale także informatyki co jest niezwykle ważne bo zakładam, że do tego typu obliczeń brak jest programów ogólnie dostępnych. Rozprawa jest obszerna (około 90 stron, choć dużą jej część zajmują tabele i wzory). Całość oparta jest na bogatej literaturze obejmującej ponad 90 pozycji. Dopełniają ją dwa dodatki prezentujące rachunek operatorowy i wyniki energii nierelatywistycznych cząsteczek  $H_2$  i HD otrzymanych przy wykorzystaniu funkcji z cuspem. Rozprawa napisana jest bardzo czytelnie poprawnym językiem.



90-924 Łódź, ul. Żeromskiego 116  
tel./fax 42 631 31 99 [piotr.paneth.pl](mailto:piotr.paneth.pl)  
[piotr.paneth@p.lodz.pl](mailto:piotr.paneth@p.lodz.pl)



# Politechnika Łódzka

Instytut Techniki Radiacyjnej

Profesor dr hab. inż. Piotr Paneth

*Dokładne wyznaczanie własności...*

*strona 2*

Część dotycząca rozwoju teorii związana jest z rekomendacją IUPAC aby właściwości magnetyczne jądra  $^3\text{He}$  przyjąć jako wzorzec uniwersalny w spektroskopii NMR. Aby było to możliwe niezbędna jest znajomość wkładu QED do stałej przesłania, co zostało osiągnięte przy wykorzystaniu bazy z jawnie skorelowanymi funkcjami Slatera (o nowatorsko zoptymalizowanych współczynnikach). Wyniki tych obliczeń zostały przedstawione w rozdziale czwartym i zestawione w Tabeli 5.1. Są one o kilka rzędów dokładniejsze niż znane dotychczas w literaturze, co nie dziwi, gdyż były one uzyskane na podstawie standardowych metod chemii kwantowej.

Kolejnym obiektem badań mgr Spyszkiewicz była cząsteczka wodoru (w odmianach homojadrowej i zawierającej różne izotopy). Wykonano konstrukcję i optymalizację funkcji falowej dla stanów wzbudzonych rotacyjnie i uzyskano na poziomie nieadiabatycznym wkłady zarówno do stałej ekranowania jak i poziomów energii co przekłada się na możliwość weryfikacji wyników spektroskopowych. W tej części pracy natrafiłem na tylko jedną rozbieżność być może wynikająca z niepewności oznaczeń: w Tabeli 5.7 podana różnica pomiędzy wartością doświadczalną a obliczoną nie jest zgodna liczbowo z tymi wartościami.

Z merytorycznego punktu widzenia badania objęte rozprawą mgr Spyszkiewicz nie budzą wątpliwości, na ile mogła by je mieć osoba dla której sukcesem obliczeniowym jest zgodność z doświadczeniem na poziomie pojedynczych kcal/mol. Ze względu na nieco niszowy, nie mniej w moim przekonaniu niezwykle istotny, charakter rozprawy znalezienie osób potrafiących w pełni docenić wyrafinowany aparat matematyczny i wyprowadzone poprawki jest zapewne zadaniem trudnym (zwłaszcza, po odrzuceniu współautorów będących liderami tematyki). W tym zakresie, ponownie pragnę zwrócić uwagę, że rozprawa oparta została o publikacje w wiodących czasopismach teoretycznej fizyki gdzie przeszły skrupulatną ocenę merytoryczną.

Podsumowując, Doktorantka osiągnęła zamierzone cele badań, wykazała się znajomością zarówno niuansów fizyki kwantowej jak i zdolnościami programistycznymi. Uważam, że przedstawiona mi do oceny dysertacja spełnia zarówno określone w Ustawie jak i zwyczajowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim i dlatego wnioskuję do wysokiej Rady Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza o dopuszczenie mgr Anny Spyszkiewicz do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



90-924 Łódź, ul. Żeromskiego 116

tel./fax 42 631 31 99 [piotr.paneth.pl](mailto:piotr.paneth.pl)

[piotr.paneth@p.lodz.pl](mailto:piotr.paneth@p.lodz.pl)