

Ocena rozprawy doktorskiej mgr Rafała Topolnickiego
pt. „*Teoretyczny opis adsorpcji i koadsorpcji Sn i Pb na Ru(0001)*”

W przedstawionej rozprawie doktorskiej mgr Rafał Topolnicki zajmuje się teoretyczną analizą procesów formowania się warstw adsorpcyjnych cyny i ołowiu oraz warstw stopów cyna-olów na powierzchni (0001) rutenu. Modelowanie własności strukturalnych i elektronowych przeprowadzono metodami teorii funkcjonału gęstości (DFT) używając pakietu obliczeniowego VASP. Tematyka rozprawy dotyczy aktualnych zagadnień, ważnych zarówno ze względu na ich znaczenie poznawcze jak i ze względu na możliwość ich wykorzystania w przyszłości do uzyskiwania nowych materiałów o pożądanym właściwościach fizycznych.

Praca doktorska, wykonana pod kierunkiem dr hab. Roberta Kucharczyka, składa się z siedmiu rozdziałów oraz bibliografii, stanowiąc typowy dla rozpraw doktorskich układ pracy liczącej 91 stron. Zestawienie bibliograficzne zawiera 84 pozycje w tym artykuły z kilku ostatnich lat, co świadczy o dobrym rozeznaniu stanu badań w podjętej tematyce. Przed spisem treści autor zamieścił Streszczenie po polsku i po angielsku.

W rozdziale 1 doktorant przedstawia motywy i uzasadnia celowość merytoryczną podjęcia badań teoretycznych układów metal-metal, w szczególności adsorpcji ołowiu i cyny na powierzchni rutenu, stawiając sobie ambitny cel stworzenia teoretycznego opisu badanych eksperymentalnie układów oraz wyjaśnienia na tym gruncie licznych kontrowersji interpretacyjnych. Autor doskonale zdaje sobie sprawę z trudności bezpośredniego przełożenia wyników symulacji na rzeczywiste procesy.

Dwa następne rozdziały poświęcone są przedstawieniu metody badawczej oraz omówieniu wyników obliczeń wstępnych. W rozdziale 2, na podstawie obszernie cytowanej literatury, doktorant prezentuje metodę badawczą DFT, opisuje procedurę analizy populacyjnej ładunków Badera oraz przedstawia konstrukcję termodynamicznych diagramów fazowych. Zaprezentowany opis świadczy o bardzo dobrej znajomości podstaw fizycznych metod teoretycznych i obliczeniowych. W rozdziale 3 znajdujemy procedury wyboru

parametrów obliczeń wraz z uzasadnieniem włączenia do obliczeń sprzężenia spin-orbita oraz wyniki obliczeń wstępnych. Obliczenia wstępne przeprowadzono w celu ustalenie preferowanych miejsc adsorpcji pojedynczych atomów cyny/ołowiu osadzonych na powierzchni (0001) rutenu.

W dwóch kolejnych rozdziałach o bliźniaczej strukturze autor prezentuje badania dotyczące odpowiednio układów Sn/Ru(0001) i Pb/Ru(0001). Oba rozdziały zawierają szczegółowy opis dostępnych danych doświadczalnych, które wykorzystano jako bazę do analizy uzyskanych teoretycznie wyników strukturalnych i elektronowych. Najbardziej znaczącym wynikiem tej części pracy jest zaproponowanie nowego modelu strukturalnego dla adwarstwy cyny, który doskonale odzwierciedla obrazy STM dla tego układu. Następny rozdział zawiera wyniki badania koadsorpcji cyny i ołowiu na powierzchni Ru(0001). Doktorant pokazał, że uporządkowane stopy powierzchniowe Sn-Pb są stabilniejsze niż czyste fazy cyny i ołowiu, co odpowiada danym doświadczalnym.

W wszystkich częściach rozprawy pan mgr Rafał Topolnicki wykorzystuje termodynamikę ab-initio, której założenia przedstawia szczegółowo w podrozdziale 2.8. Chociaż autor zdaje sobie sprawę z przybliżonego charakteru tego podejścia to mój niepokój budzi mieszanie wielkości obliczonych dla temperatury zera bezwzględnego z parametrem zależnym od temperatury i ciśnienia. Konkretna wartość potencjału chemicznego wynika, jak słusznie zauważa autor, z warunków eksperymentalnych (temperatura i ciśnienie osadzanych atomów). Wydaje się jednak, że w zastosowanym przybliżeniu interpretacja tego parametru nie jest tak oczywista. Czy mógłby Pan to skomentować?

Prowadzona na bieżąco wnikliwa, krytyczna analiza uzyskiwanych wyników wskazała na konieczność modyfikacji konstrukcji diagramu fazowego. Zaproponowane przez autora podejście pozwala na uwzględnienie współistnienia stopu z czystymi fazami. W pracy przedstawiony jest algorytm wyznaczania dyskretnego diagramu fazowego a autor przygotował program w C++, którego używał w swoich obliczeniach.

W podsumowaniu mgr Rafał Topolnicki klarownie wypunktował wszystkie znaczące wyniki prezentowanej rozprawy oraz krótko wskazał możliwości dalszego rozwoju podjętej tematyki.

Przedstawiona rozprawa doktorska zawiera bardzo wartościowe i oryginalne wyniki, które zostały już w części opublikowane (5 prac, w tym jedna w przygotowaniu) a jej autor wykazał się rzetelną wiedzą i znajomością literatury, co wykorzystał zarówno do prawidłowego postawienia zadań badawczych jak i ich późniejszej interpretacji. Należy

również podkreślić, że oceniana praca ukazuje mgr Rafała Topolnickiego jako sumiennego badacza o solidnych umiejętnościach posługiwania się techniką obliczeniową DFT.

Z dużą przyjemnością stwierdzam, że rozprawa napisana jest ładną polszczyzną z kilkoma tylko drobnymi błędami oraz, że charakteryzuje się starannym dopracowaniem edytorskim co przyczyniło się do znacznego ułatwienia zadania postawionego recenzentowi. Ponadto, praca nie jest zwykłą relacją wyników naukowych. Autor w bardzo interesujący sposób prowadzi czytelnika przez proces badawczy odpowiadając sukcesywnie na pytania rodzące się podczas czytania.

Moim zdaniem mgr Rafał Topolnicki umiejętnie zrealizował postawione zadania i jest dobrze przygotowany do pracy badawczej w dziedzinie fizyki ciała stałego a przedstawiona rozprawa doktorska spełnia w nadmiarze warunki stawiane przez Ustawę o tytułach i stopniach naukowych. Z pełnym przekonaniem wnioskuję o dopuszczenie Doktoranta do publicznej obrony oraz o wyróżnienie rozprawy doktorskiej.

