

dr hab. P.F.Góra  
Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki  
Stosowanej UJ  
tel. (12) 664 4566  
e-mail pawel.gora@uj.edu.pl

Kraków, 15 maja 2016



UNIwersytet  
JAGIELLOŃSKI  
W KRAKOWIE

Wydział

Fizyki

Astronomii

i Informatyki

Stosowanej

### Recenzja

pracy doktorskiej pana mgr. inż. Michała Jaremy

*Analysis of effective non-centrosymmetric orientational ordering of a system of interacting octupolar molecules in an external electrostatic field*

Praca doktorska pana Michała Jaremy poświęcona jest teoretycznej analizie cząsteczek o nieznikającym momencie oktopolowym, jako kandydatów do wykorzystania w optyce nieliniowej. Szczegółowy problem, jaki postawił sobie doktorant, dotyczył tego, czy da się złagodzić bardzo restrykcyjne wymagania (temperatury znacznie poniżej temperatury nadciekłego helu) stawiane układom z takimi cząsteczkami, jakie wynikały z poprzednich badań. Odpowiedź uzyskana przez doktoranta jest twierdząca.

Praca pana Jaremy za punkt wyjścia bierze wcześniejsze publikacje Josepha Zyssa i Antoniego Mitusia, współpromotorów tej rozprawy.

Praca podzielona jest na szereg rozdziałów. Część I (Rozdziały 1 i 2) ma charakter wstępny. Część II (Rozdziały 3 i 4) poświęcona jest geometrycznemu modelowaniu cząsteczek oktopolowych i szacowaniu, na podstawie obliczeń chemii kwantowej, zakresu dostępnych/możliwych parametrów, co jest ważne, gdyż *experimental data on octupole moment [...] is scarce* (str. 29). W Części III rozważane są nieoddziałujące, idealne i zdeformowane cząsteczki oktopolowe w zewnętrznych, odpowiednio ukształtowanych polach elektrostatycznych - cząsteczki planarne w Rozdziale 4 i cząsteczki o strukturze trójwymiarowej w Rozdziale 5. Ta część zawiera najcenniejsze wyniki rozprawy: Autor pokazuje, że użyteczne konfiguracje można uzyskać dla temperatur rzędu kilku kelwinów, a więc trzy rzędy wielkości większych, niż wynikałoby to z pracy Mitusia, Pawlika i Zyssa (Ref. [13] pracy doktorskiej) sprzed kilku lat. Stwierdzam, iż to osiągnięcie doktoranta stanowi istotny postęp w stosunku do dotychczasowej wiedzy. Wreszcie Część IV (Rozdziały 7, 8 i 9) dotyczy oddziałujących oktopoli, z dodanym momentem dipolowym i bez, w postaci klastrów molekularnych i układów sieciowych. Część ta zawiera szereg ciekawych wyników, które autor określa mianem "jakościowych" (*qualitative*), co skomentuję poniżej. Głównym wynikiem tej części jest obserwacja, że układ oddziałujących oktopoli na sieci mógłby być realizowalny już w temperaturze porównywalnej z temperaturą ciekłego azotu!

Przygotowując rozprawę, mgr inż. Michał Jarema dowiódł, że opanował cały szereg technik analitycznych - macierze Wignera, rachunek kwaternionów (na przykład bardzo eleganckie pokazanie w Rozdziale 6.2, jak kwaterniony

ul. prof. Stanisława

Łojasiewicza 11

PL 30-348 Kraków

tel. +48(12) 664-48-90

fax +48(12) 664-49-05

e-mail:

wydzial.fais@uj.edu.pl

upraszczają obliczenia analityczne i interpretację wyników), analiza stabilności - oraz numerycznych: obliczenia chemii kwantowej (z uwzględnieniem ograniczeń dostępnych programów!), a przede wszystkim symulacje Monte Carlo. Cały kontekst pracy i zawarty w niej spis literatury dowodzą z kolei, że doktorant sprawnie porusza się w istniejącej wiedzy dotyczącej interesujących go zagadnień. Stwierdzam przeto, iż pan Jarema biegle opanował warsztat naukowy młodego fizyka-teoretyka.

Od strony edytorskiej praca przygotowana jest bardzo starannie. Układ jest czytelny i przejrzysty. Praca napisana jest w języku angielskim i choć miejscami widać, że język ten jest dla autora językiem obcym, gdyż użyte sformułowania są nienaturalne, jakby wprost przeniesione z języka polskiego, tu i ówdzie autor stosuje niewłaściwy czas gramatyczny, miesza formy brytyjskie (np. *behaviour*) z amerykańskimi (np. *center*) i popełnił kilka błędów interpunkcyjnych (nie ma za to błędów ortograficznych), do angielszczyzny nie można mieć zastrzeżeń. Jest ona na poziomie wyższym od tego, co typowo spotyka się w pracach naukowych osób, dla których angielski nie jest językiem ojczystym.

Autor nie ustrzegł się jednak pewnych błędów. Pierwszy wynika, jak sądzę, z pewnej niezręczności w sformułowaniu. Mianowicie, począwszy od rozdziału 7 autor rozważa rotujące oktopole (patrz na przykład str. 65 u dołu, *octupoles rotating around their fixed centers*). Rozumiem (mam nadzieję!), że nie chodzi o fizycznie rotujące oktopole, a jedynie o formalną zmianę położenia w przestrzeni stanów i wynikającą stąd zmianę energii. Fizycznie rotujące oktopole musiałyby wytwarzać promieniowanie elektromagnetyczne, pozostałe cząstki musiałyby z tym polem promieniowania oddziaływać, a z układu wybiekałyby energia. Znaczy to jednak, że rozważania autora dotyczące krajobrazu energetycznego mają charakter statyczny. Gdyby uwzględnić dynamikę, a więc możliwe zmiany w czasie położenia (i orientacji) poszczególnych oktopoli, należałoby uwzględnić efekty promieniste, a przynajmniej oszacować, czy ich skumulowany efekt jest zanedbywalnie mały w dostępnych skalach czasu. Odnosi się to w szczególności do przejść pomiędzy fazą całkowicie a częściowo uporządkowaną, opisywanych w Rozdziale 7.3.2: autor uwzględnia jedynie oddziaływania elektrostatyczne, całkowicie pomijając możliwe efekty promieniste. Rozumiem jednak, że uwzględnienie tych efektów bardzo skomplikowałoby cały opis.

Inne moje zastrzeżenie odnosi się do "jakościowego" charakteru wyników zawartych w Części IV. We wchodzących w jej skład Rozdziałach znajdują szereg sformułowań w rodzaju

- *a thumb-rule for the formulation of a ground state* (str. 70; na tę "regułę kciuka" autor powołuje się później wielokrotnie)
- *we believe that it is the gear-like rotation...* (str. 71)

- *we expect simulations to show...* (str. 72)
- *we believe that the initially disordered system will remain disordered* (str. 74)
- *it is not clear whether the correlation [...] is an effect of electrostatic interactions, or...* (str. 74)
- *we believe that [...] this approach provides more insight* (str. 82)
- *we ignore other configurations which might also satisfy the requirement...* (str. 83)
- *we believe that slight differences between  $\phi_1$ ,  $\phi_2$ ,  $\phi_3$ , result from boundary effects...* (str. 87)
- *it seems that the additional degrees of freedom...* (str. 88)

i wiele podobnych. Oznacza to, że szereg wyników zawartych w tych Rozdziałach, skądinąd ciekawych, ma charakter nie tyle "jakościowy", jak ujmuje to autor, ale spekulatywny. Muszę powiedzieć, że nie jestem tym zachwycony. Doktorant przedstawia możliwe efekty, jakie dałoby się obserwować w układach oddziałujących oktupoli, ale "jakościowy" charakter tych rozważań sprawia, że nie mogą być one uznane za dowód, iż tak się rzeczywiście dzieje. A szkoda. Jest całkiem możliwe, że intuicje autora są poprawne i aż żal, że w pewnej części pozostają one jedynie intuicjami. Jak w wielu miejscach zauważa sam autor, głębsza i bardziej przekonująca analiza wymagałaby znacznie bardziej złożonych i długotrwałych obliczeń numerycznych. Domyślałem się, że autorowi zabrakło na nie czasu. Być może było to konsekwencją pewnego błędu uczynionego w samej koncepcji pracy. Mianowicie, doktorant postanowił przeanalizować i oktupole planarne, i trójwymiarowe. Jak się okazało, oktupole trójwymiarowe nie prowadzą do jakościowo nowych efektów, więc, moim zdaniem, można je było pominąć, skupiając się na lepszej, lepiej udokumentowanej analizie układów z cząsteczkami planarnymi. Otrzymalibyśmy pracę *formalnie* uboższą, ale *faktycznie* lepszą.

Skądinąd to, że oktupole trójwymiarowe nie są jakoś szczególnie ciekawe w porównaniu do oktupoli planarnych, wiemy właśnie dzięki badaniom autora, przedstawionym w niniejszej rozprawie. Tę obserwację także należy docenić jako liczącą się rezultat pracy.

Spośród wielu pytań szczegółowych, jakie chciałbym zadać doktorantowi, ograniczę się w tym miejscu do dwóch: Mianowicie w Rozdziałach 7 i 8 pan Jarema rozważa oddziałujące oktupole umieszczone na sieci trójkątnej. Nigdzie nie znalazłem jednak uzasadnienia dla takiego wyboru sieci. W przypadku cząsteczek trójwymiarowych, które autor rozważa na sieci typu BCC, stwierdza on, iż *this choice was guided by the geometry of the Ground State configuration [...] one can expect that this geometry can be preserved for the nearest neighbours in a BCC cluster* (str. 98). Rozumiem, że podobny argument poddyktował wybór sieci trójkątnej dla konfiguracji płaskiej. Ciekawe jest jednak,

czy opisywane efekty zachodziłyby także dla sieci kwadratowej? Na przykład czy na takiej sieci pojawiałyby się współzawodnictwo oddziaływań konstruktywnych i destruktywnych, odpowiadające sytuacji z Rysunku 8.6?

Szkoda także, iż autor nie pokusił się o przeanalizowanie sytuacji z Rysunków 7.6 i 7.7 w języku przejść fazowych. O przejściu fazowym autor pisze w Rozdziale 7.4.2. Zauważam też, że parametry porządku (2.7), (2.8) mają *formalną* postać taką, jak w modelu synchronizacji Kuramoto. Czy opis zjawisk badanych przez doktoranta byłby możliwy w języku synchronizacji? Czy byłby ciekawy? (Nie jest to zarzut, a co najwyżej pewna sugestia na przyszłość.)

Rekapitulując, recenzowana praca doktorska pana Michała Jaremy nie jest co prawda wolna od pewnych mankamentów, ale zawiera szereg ciekawych i ważnych wyników, dowodząc jednocześnie znacznych kompetencji warsztatowych autora. Te aspekty zdecydowanie dominują w ostatecznej ocenie pracy.

Stwierdzam, że przedłożona praca doktorska pana mgr. inż. Michała Jaremy spełnia wszystkie ustawowe i zwyczajowe wymogi stawiane rozprawom doktorskim. Wnoszę o dopuszczenie pana Michała Jaremy do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

