



Toruń, dn. 10.08.2025r.

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 mgr Isabel Marii Arias-Camacho zatytułowanej „*Effects of the adsorption of harmful gas molecules on boron-based materials*”

Oceniana rozprawa napisana została pod kierunkiem prof. dr hab. dr hab. Nevilla Gonzaleza Szwackiego w Instytucie Fizyki Doświadczalnej, Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego. Praca doktorska przedstawia wyniki badań teoretycznych materiałów dwuwymiarowych na bazie boru domieszkowanych metalami przejściowymi w kontekście ich oddziaływania z małymi cząsteczkami w szczególności szkodliwymi gazami. Przeprowadzono obliczenia dedykowanymi metodami funkcjonatu gęstości oraz wnikliwą analizę rezultatów. Pokazano między innymi, że adsorpcja szkodliwych cząsteczek gazu (CO, CO₂, NO, NO₂ i NH₃) wpływa na właściwości strukturalne, elektronowe i magnetyczne badanych borofenów o strukturze α -sheet, heksagonalnej pofałdowanej i typu plastra miodu. W szczególności pokazano, że transfer ładunku między cząsteczkami a strukturą 2D destabilizuje wiązania, co powoduje, że bor tworzy z sąsiadami hybrydyzację sp^3 zamiast sp^2 , co prowadzi do silnego wiązania z adsorbatem, w tym wypadku cząsteczkami gazów. Z kolei obliczenia dla dwuwymiarowych układów MBenes, gdzie M to metale przejściowe, nie tylko wskazały te układy jako adsorbenty szkodliwych gazów, ale też potwierdziły ich dużą wytrzymałość strukturalną, dobre przewodnictwo elektryczne a uzyskane momenty magnetyczne wskazują na ich możliwe zastosowania w wysokotemperaturowej spintronice. Wszystkie otrzymane wyniki są bardzo wartościowe z punktu widzenia potencjalnych zastosowań oraz planowania eksperymentu. Należy też podkreślić, że badane układy dwuwymiarowe w tym poliformy borofenu oraz Mbenes, są ciągle mało poznane, pomimo ich potencjalnych zastosowań w nanotechnologii jako alternatywy dla układów grafenowych.

Dlatego też tematyka rozprawy jest jak najbardziej aktualna a badania niezmiernie ważne i pożądane zarówno od strony poznawczej jak i potencjalnych aplikacji.

Rozprawa doktorska magister Isabel Marii Arias-Camacho napisana została w języku angielskim i liczy prawie 130 stron. Literatura jest obszerna i bardzo dobrze dobrana do



prezentowanych zagadnień. Na pracę składają się cztery publikacje zaprezentowane i omówione w rozdziale trzecim.

1. Arias-Camacho, I.M.; Gonzalez Szwacki, N. Exploring the Structural, Electronic, Magnetic, and Transport Properties of 2D Cr, Fe, and Zr Monoborides Materials 16, 5104 (2023)
2. Arias-Camacho, I.M., Influence of the Hubbard U Parameter on the Structural, Electronic, Magnetic, and Transport Properties of Cr/Fe/Zr-Based MBenes ACS Omega 8, 47, 45003–45012 (2023)
3. Arias-Camacho, Isabel M. and Gonzalez Szwacki, Nevill Exposure of MBenes to environmentally hazardous molecules Surfaces and Interfaces 56, 105665 (2025)
4. Isabel M. Arias-Camacho and Nevill Gonzalez Szwacki Borophene sheets as potential candidates for the detection and removal of harmful gas molecules Solid State Communications 401, 115905 (2025)

Każda z tych prac jest poprzedzona wstępem omawiającym główne cele i wyniki prezentowane w publikacjach. Całościowe podsumowanie wyników a także potencjalne zastosowanie uzyskanych wyników oraz dalsze plany badawcze przedstawiono w rozdziale IV.

Praca doktorska 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.

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. W pierwszej części tego rozdziału przedstawiono zarówno równanie Schrödingera i kilka przybliżonych metod jego rozwiązania, jak i metody teorii funkcjonału gęstości (DFT), wspomniano o metodzie funkcji Greena i równaniach Bethe-Salpeter. Kolejna część omawia metody i zagadnienia związane ściśle z przeprowadzonymi obliczeniami w ramach teorii ciała stałego w tym model Hubbarda, poprawki dyspersyjne w metodzie DFT, czy przewodnictwo elektronowe i równanie transportu Boltzmanna. Niestety ten rozdział jest bardzo nierówny w swojej jakości. Jego pierwsza część obejmująca równanie Schrödingera, opis metody Hartree-Focka oraz wprowadzenie do metod DFT jest bardzo powierzchowna i często nieprecyzyjna i w sumie mogłaby zostać zastąpiona krótkim paragrafem bez szczegółów, co pozwoliłoby uniknąć ogólności i powierzchowności opisu i kilku błędów merytorycznych, których z premedytacją nie wymieniam. Niemniej, druga część rozdziału „metodologicznego” zaciera złe wrażenie z jej pierwszej części i opisuje już konkretne warianty metod obliczeniowych użytych w badaniach. W tym miejscu 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. Od strony technicznej, językowej i co najważniejsze merytorycznej praca napisana jest w sposób zadowalający. Chciałbym w tym miejscu zapytać o kilka aspektów związanych z recenzowaną pracą.

- Autorka zarówno we wstępie jak i podsumowaniu wskazuje na potencjalne zastosowania badanych układów w wysokotemperaturowej spintronice. Czy można wskazać na konkretne przykłady zastosowań i wiarygodnie określić ich możliwość zastosowania w wysokotemperaturowej spintronice?
- Czy badano zależność wyników końcowych od użytych w obliczeniach funkcjonałów DFT (w pracy wykorzystywano głównie PBE)?
- Dlaczego w obliczeniach DFT (LDA, GGA) konieczne jest użycie poprawek dyspersyjnych do opisu oddziaływań słabych typu Van der Waalsa?

W podsumowaniu pragnę stwierdzić, iż recenzowaną rozprawę doktorską mgr Isabel Marii Arias-Camacho oceniam bardzo pozytywnie. Podjęty przez doktorantkę program badawczy dotyczy ważnej tematyki o dużym znaczeniu poznawczym i możliwościach aplikacyjnych. Przedstawiony w pracy opis badań teoretycznych nad dwuwymiarowymi materiałami na bazie boru oraz ich oddziaływaniem z małymi cząsteczkami, pokazujący wpływ adsorpcji na właściwości fizykochemiczne tych układów jest bardzo wartościowy i zaawansowany metodologicznie.

Mgr Isabel Maria Arias-Camacho wykazała się dużą wiedzą ogólną oraz biegłością w wykorzystaniu zaawansowanych metod obliczeniowych, narzędzi teoretycznych, w tym programów komputerowych, oraz przeprowadzania wnikliwej analizy i opracowania otrzymanych wyników. Świadczy to o umiejętności doktorantki do efektywnego prowadzenia pracy naukowej. Bardzo ważnym jest też aspekt powiązania obliczeń z eksperymentem zarówno na etapie jego interpretacji jak i planowania badań eksperymentalnych oraz potencjał wdrożeniowy otrzymanych wyników.

W mojej ocenie ilość i jakość otrzymanych wyników opublikowanych w renomowanych czasopismach w zupełności spełnia wymagania stawiane rozprawom doktorskim. Nie mam więc wątpliwości, że rozprawa magister Isabel Marii Arias-Camacho spełnia warunki i wymagania stawiane rozprawom doktorskim i wnoszę o dopuszczenie jej autorki do kolejnych etapów przewodu doktorskiego.

Ireneusz Grabowski