

Rzeszów, 7 września 2008

Dr hab. Anna Kucaba-Pietal, Prof. nadzw. PRz  
Zakład Mechaniki Płynów i Aerodynamiki  
Wydział Budowy Maszyn i Lotnictwa  
Politechnika Rzeszowska

## **Recenzja rozprawy doktorskiej**

mgr. Agnieszki Małgorzaty Słowickiej:

### **„Badanie metodą dynamiki molekularnej powstawania wybranych nanostruktur w emulsjach”**

Recenzja opracowana została na podstawie pisma z dnia 17 czerwca 2008 Pana Prof. dr hab. Kazimierza Piechóra, Sekretarza Rady Naukowej Instytutu Podstawowych Problemów Techniki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie, w związku z przewodem doktorskim Pani mgr Agnieszki Słowickiej prowadzonym tamże.

#### **1. Przedmiot recenzji**

Rozprawa doktorska Pani mgr Agnieszki Słowickiej zatytułowana *Badanie metodą dynamiki molekularnej powstawania wybranych nanostruktur w emulsjach* liczy 88 stron. Zawartość pracy podzielono na trzy części. Praca zawiera również 49 rysunków, 3 tabele oraz spis literatury obejmujący 79 pozycji, w tym dwie współautorstwa Doktorantki.

#### **2. Tematyka, cel i zakres pracy**

W chwili obecnej technologie materiałowe należą do najbardziej obiecujących, a przez to najszybciej rozwijających się dziedzin nauki i techniki. Jedną z proponowanych nowoczesnych nanotechnologii do wytwarzania nanostruktur jest metoda wykorzystująca efekt gromadzenia się substancji na granicy faz emulsji. Emulsja spełnia rolę matrycy, na której powstaje struktura wytwarzanego nanomateriału.

Nanomateriały o określonej strukturze – zwane nanostrukturami - mają właściwości przewyższające klasycznie otrzymywane materiały; prowadzone są badania nad tworzeniem nowszych i lepszych. Znajdują one zastosowanie w różnych dziedzinach życia: w medycynie, w lotnictwie, itp.

Powstaje więc podstawowe pytanie w jaki sposób można świadomie projektować i wytwarzać nanostrukturę o określonych właściwościach i jakich substancji należy w tym celu użyć. Odpowiedź wymaga poznania i zrozumienia procesów, jakie zachodzą w skali molekularnej. Tematyka ta została podjęta w recenzowanej pracy.

Podstawowym celem, który stawia Autorka w rozprawie, jest znalezienie molekularnego modelu takich substancji, które w procesie osiadania na granicy faz emulsji utworzą strukturę graniczną, będącą pierwszym etapem tworzenia nanomateriału. Ponieważ tak drobne układy wymagają modelowania na poziomie atomowym, do opisu procesów zachodzących w cieczach posłużono się metodą Dynamiki Molekularnej.

Zakres pracy obejmuje między innymi:

- zaproponowanie modeli molekularnych substancji biorących udział w procesie tworzenia emulsji oraz określenie oddziaływań międzyatomowych charakteryzujących dynamikę układu,
- wykonanie symulacji tworzenia emulsji z tych substancji metodą dynamiki molekularnej,
- w oparciu o przeprowadzone wyniki symulacji metodą dynamiki molekularnej określenie warunków w jakich zjawisko osiadania substancji na granicy fazy emulsji może wystąpić,
- zaproponowanie kilku typów substancji, które – dzięki molekularnym właściwościom – mogłyby utworzyć pożądaną warstwę graniczną na granicy fazy emulsji,
- testowanie numeryczne zaproponowanych układów, celem znalezienia optymalnych kombinacji oddziaływań międzyatomowych, zapewniających powstawanie oczekiwanej nanostruktury,
- weryfikacja modeli molekularnych symulowanych ośrodków.

Uważam, że postawiony cel badań został trafnie sformułowany zarówno z naukowego jak i użytecznego punktu widzenia. Tematyka podjęta w recenzowanej pracy doktorskiej jest nowatorska i ma duże znaczenie teoretyczne i praktyczne, zaś zakres rozprawy jest w pełni uzasadniony.

### **3. Merytoryczna ocena rozprawy**

Rozprawa doktorska Pani mgr Agnieszki Małgorzaty Słowickiej składa się z trzech części, powiązanych ze sobą merytorycznie oraz logicznie, tworzących spójną, zwartą całość. Jest napisana poprawnie, bardzo ładnym językiem, przejrzysto. Treść wzbogacona jest licznymi bardzo starannie wykonanymi ilustracjami ułatwiającymi przyswojenie wywodów. Jej struktura i układ są prawidłowe.

Pierwsza część ma charakter wprowadzający w ogólną problematykę nano- i mikromechaniki w aspekcie wytwarzania nanourządzeń oraz nanomateriałów.

