

**UNIwersytet Marii Curie-Skłodowskiej
WYDZIAŁ CHEMII
pl. Marii Curie-Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin**

dr hab. Piotr Borowski
tel. 81-537-56-71
e-mail: piotr.borowski@poczta.umcs.lublin.pl

Lublin, 1 stycznia 2019

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr inż. Joanny Bednarskiej pt. *„Absorpcyjne
widma dwufotonowe cząsteczek w roztworach: symulacje z zasad pierwszych”***

Recenzowana rozprawa dotyczy teoretycznych badań nad zjawiskiem absorpcji dwufotonowej – zjawiskiem przewidzianym teoretycznie blisko 90 lat temu, które dopiero po latach doczekało się potwierdzenia eksperymentalnego, kiedy badanie zjawisk nieliniowych stało się możliwe dzięki postępom w rozwoju technik laserowych. Nie sposób nie docenić jego praktycznego znaczenia. Jak powszechnie wiadomo promieniowanie elektromagnetyczne o długościach fali poniżej 400 nm, tj. zaczynających się już od nadfioletu, ma destrukcyjny wpływ na organizm ludzki. Wystarczy tu wspomnieć o chorobach skóry wywołanych promieniowaniem słonecznym, począwszy od rógowacenia (z pozoru niegroźnych zmian przednowotworowych), a skończywszy na czerniaku – jednym z najbardziej złośliwych nowotworów. Sprawia to, że konwencjonalne metody badania tkanek, np. metody wykorzystujące jednofotonowe techniki spektroskopii elektronowej, mogą okazać się niebezpieczne dla człowieka, gdyż znaczna część przejść elektronowych przypada właśnie na nadfiolet. Możliwość absorpcji promieniowania o falach dwukrotnie dłuższych wywołujących przejścia elektronowe (zakres VIS i NIR) daje więc alternatywne i bezpieczne metody badawcze w szeroko pojętej medycynie. Niezależnie jednak od rozwoju technik eksperymentalnych badania teoretyczne nad absorpcją dwufotonową są absolutnie niezbędne ponieważ umożliwiają, a przynajmniej ułatwiają interpretację wyników eksperymentalnych. Ponadto wyprzedzają one nieraz badania eksperymentalne (np. przy projektowaniu cząsteczek charakteryzujących się wysokim przekrojem czynnym na absorpcję dwufotonową). Pomimo zaangażowania wielu zespołów

w rozwój teorii absorpcji dwufotonowej, szeroka gama problemów wymaga dalszych badań. W szczególności dotyczy to właśnie problematyki podjętej w recenzowanej rozprawie, która jest ze wszech miar ważna i mieści się z nurcie aktualnych naukowych tematów badawczych.

Rozprawa doktorska Pani mgr inż. Joanny Bednarskiej liczy 175 stron, zawiera 18 tabel i 56 rysunków. Autorka cytuje ponad 200 pozycji literaturowych z dziedziny, z których część to „klasyka” – prace liderów nauki światowej. Wskazuje to na głęboką znajomość literatury przedmiotu. Praca podzielona jest na 5 rozdziałów, z których najobszerniejszy rozdział czwarty to badania własne Autorki. W części literaturowej (rozdziały 2 i 3) podane są informacje niezbędne do ich zrozumienia. Opisane są więc aspekty metodologiczne teoretycznego pozyskiwania widm elektronowych oraz omówiona jest teoria funkcyjności gęstości, teoria chyba najczęściej wykorzystywana obecnie w obliczeniowej chemii kwantowej. Duży nacisk położony jest na przegląd literatury od strony aplikacyjnej, co uważam za słuszne i bardzo użyteczne. Na końcu rozprawy możemy znaleźć dodatek stanowiący uzupełnienie rozdziału czwartego, spis tabel i rysunków oraz cytowaną literaturę. Bardzo pomocnym jest również spis akronimów wykorzystywanych w tekście zamieszczony na samym początku rozprawy. Od strony technicznej praca wykonana jest bardzo starannie. Rysunki i tabele są czytelne i estetyczne. W części badawczej rozprawy znajdują się podsumowania „cząstkowe” kolejnych wątków badawczych przez Autorkę, co bardzo ułatwia czytanie pracy.

Podstawę rozprawy doktorskiej mgr inż. Joanny Bednarskiej stanowi 5 artykułów opublikowanych w renomowanych czasopismach z bazy JCR. Są to: *Journal of Chemical Theory and Computation* (dwa artykuły) oraz *Molecules*, *Physical Chemistry Chemical Physics* i *Journal of Physical Chemistry B* (po jednym artykule). Ich sumaryczny IF zgodnie z rokiem opublikowania wynosi 20.809. Jest to wynik bardzo dobry. Prace te są wieloautorskie, jednakże wkład Kandydatki w ich powstanie jest wiodący. Świadczy o tym fakt, iż w czterech z nich jest pierwszym autorem. Jest w nich również jednym z autorów korespondencyjnych. Prace te oceniane już były od strony merytorycznej przez ekspertów, i to – biorąc pod uwagę rangę czasopism – przez ekspertów o uznanej pozycji na arenie międzynarodowej. Tak więc poziom prezentowanych w nich badań jest bardzo wysoki. Poza wymienionymi pracami jest Ona również współautorką dwóch artykułów niebędących przedmiotem rozprawy doktorskiej o sumarycznym IF wynoszącym 5.178. Warto również wspomnieć o tym, że choć Kandydatka dopiero od kilku lat prowadzi badania, została już zauważona w środowisku naukowym. Świadczy o tym liczba cytowań, która

– po odrzuceniu autocytowań – wynosi 34 i indeks Hirsha równy 5 (dane wg WOS z dn. 1 stycznia 2019). Całościowo legitymuje się więc bardzo poważnym dorobkiem naukowym jak na ten etap kariery naukowej, a recenzowana rozprawa zawiera wiele elementów nowości naukowej. Pozwolę je sobie krótko opisać, choć z pewnością – biorąc pod uwagę ogromny materiał badawczy przedstawiony w rozprawie – nie odniosę się do wszystkich.

W rozdziale 4.1 Autorka uogólnia opisany w części literaturowej model kilkustanowy dla teorii hermitowskich pozyskiwania aktywności dwufotonowej dostosowując go do obliczeń na poziomie niehermitowskiej metody sprzężonych klasterów (CC). Jest to bowiem (zresztą bardzo słusznie) metoda odniesienia w testach porównawczych, które zostały przeprowadzone w celu określenia przydatności znanych funkcjonałów gęstości w obliczeniach aktywności dwufotonowej. Jak się okazuje, tzw. prawy i lewy moment przejścia obliczone na poziomie CC nie muszą być sobie równe, co powinno zostać uwzględnione przy wyznaczaniu intensywności dwufotonowej. Wprawdzie wyprowadzenie stosownych równań opisane zostało w ostatniej pracy z cyklu, niemniej jednak – biorąc pod uwagę wielowątkowość badań i systematyczność ich opisu w rozprawie – zasadnym wydaje się jego umieszczenie na początku rozdziału poświęconego badaniom własnym. Tę część uważam za bardzo istotny wkład metodologiczny Kandydatki w rozwój obliczeniowej chemii kwantowej.

W rozdziale 4.2 Kandydatka poddała krytycznej ocenie wybrane funkcjonały gęstości pod kątem ich przydatności w przewidywaniu intensywności przejść dwukwantowych. Za metodę odniesienia wybrała, jak wspomniałem wyżej, metodę sprzężonych klasterów, a dokładniej – jeden z jej algorytmów obliczeniowych, którym jest RI-CC2. Metoda ta daje bowiem wyniki bliskie eksperymentalnym. Testy zostały przeprowadzone na dwóch grupach cząsteczek, a mianowicie organoboranów i difluoroboranów (wydaje się jednak, iż bardziej poprawnym terminem dla drugiej grupy związków jest „estry kwasów difluoroboranowych”, ang. *difluoroborates*). Obliczenia wykonała metodami sumowania po stanach i funkcji odpowiedzi. Testy takie są niezwykle ważne i użyteczne z uwagi na fakt, że metody DFT w porównaniu do skorelowanych metod *ab initio* są „tanie” z obliczeniowego punktu widzenia, jednakże często nie dają zadowalających wyników w odniesieniu do niektórych właściwości. Z uwagi na brak w literaturze doniesień na ten temat, zwłaszcza doniesień wyjaśniających przyczyny rozbieżności intensywności obliczonych metodami DFT a intensywnościami odniesienia, wkład Autorki na tym polu jest również bardzo poważny. Przy okazji skorelowała Ona wartości przekroju czynnego

na absorpcję dwufotonową ze zmianami strukturalnymi w obrębie cząsteczek wspomnianych wyżej estrów, takimi jak obecność podstawników elektronodonorowych, obecność wiązań podwójnych itd. Nie będę w tym miejscu powtarzał wniosków zamieszczonych w rozprawie. Poproszę jedynie o komentarz w następującej sprawie. Otóż optymalizacja geometrii rozważanych cząsteczek przeprowadzona została na poziomie B3LYP (znanym z przewidywania bardzo dokładnych geometrii równowagowych). Wydaje się jednak, że użycie kosztownej bazy Dunninga typu tripple zeta do pierwszego zestawu cząsteczek stanowi „dodatek do luksusu” (oczywiście nie jest to błąd). W moim przekonaniu można tu było z powodzeniem zastosować analogiczną i kilkakrotnie tańszą bazę Pople’a prawdopodobnie bez straty jakości wyników. Natomiast niepokoi mnie nieco obniżenie jakości bazy do cc-pVDZ w obliczeniach funkcji odpowiedzi zwłaszcza na poziomie RI-CC2. Wymogi skorelowanych metod *ab initio* w odniesieniu do bazy funkcyjnej są wyższe niż DFT (baza służy nie tylko do opisu orbitali zajętych, z których w DFT budujemy gęstość elektronową, służy również do opisu orbitali wirtualnych, do których uwzględnia się wzbudzenia). Wprawdzie Autorka przeprowadza test z wykorzystaniem bazy aug-cc-pVDZ nie stwierdzając znaczących różnic otrzymanych wyników, wydaje się jednak, że większe znaczenie w przypadku rozważanych cząsteczek powinno mieć „uelastycznienie” bazy przez zastosowanie kontrakcji VTZ, niż dodanie funkcji rozmytych. Jest to oczywiście sprawa dyskusyjna. Przy okazji, w ostatniej linii na stronie 80 bezpieczniej jest użyć terminu „mostka alkenylowego”, a nie „winyłowego”.

Rozdział 4.3 poświęcony jest jedno- i dwufotonowym widmom absorpcyjnym wykazującym strukturę oscylacyjną. Autorka ponownie skoncentrowała się na ocenie przydatności różnych funkcjonałów wymiennie-korelacyjnych do ich symulacji wykorzystując cztery grupy związków. Zaproponowała niezwykle ciekawy schemat tej oceny, zdecydowanie odbiegający od przyjętych jakościowych standardów wizualnego porównywania widm symulowanych z widmami odniesienia. Polega on na porównaniu wyznaczonych dla testowanej metody i metody odniesienia wibracyjnych energii reorganizacji. W rozdziale tym przekonywująco zademonstrowała, że zgodność tych parametrów (z dokładnością do 10%) prowadzi do zbliżonych kształtów progresji oscylacyjnej. Taka jednoparametrowa ocena jest bardzo użytecznym narzędziem w obliczeniowej chemii kwantowej, gdyż ma ona charakter ilościowy. Warto dodać, że w symulacjach struktury oscylacyjnej widm dwufotonowych Autorka nie ograniczyła się jedynie do liniowego przybliżenia tensora momentu przejścia drugiego rzędu względem współrzędnych normalnych. Przy okazji scharakteryzowała Ona pod kątem spektroskopowym nową grupę

związków uzyskanych w zespole prof. Ośmiałowskiego. Ponownie nie będę rozwlekał recenzji i przytaczał wniosków, które są bardzo przejrzyście ujęte w rozprawie tylko poproszę Autorkę o komentarz, tym razem w odniesieniu do dwóch spraw. Po pierwsze czy podpisy osi odciętych na rysunkach 4.12 i 4.13 nie powinny być „Liczba falowa $\times 10^{-4}$ ”, a nie jak jest „... $\times 10^{-3}$ ”? Po drugie w symulacjach wykorzystany został model LCM wyznaczania całek nakładania oscylacyjnych funkcji falowych dla stanów elektronowych, między którymi dochodzi do przejścia spektralnego. Jest to model najprostszy z możliwych. Wprawdzie na podstawie danych literaturowych Autorka stwierdza, że „...dla wielu układów udało się poprawnie oszacować kształt pasm absorpcyjnych...” (por. str. 34), jednakże może warto byłoby w przyszłości przyjrzeć się bardziej zaawansowanym metodom. Moja sugestia wynika z faktu, iż to, które funkcjonały sprawdzają się najlepiej, w bardzo dużym stopniu zależy od tego, jaką grupę związków rozpatrujemy. Nie jest więc wykluczone, że wykorzystanie bardziej zaawansowanych algorytmów zmieniłoby nieco ostateczne wnioski, tym bardziej, że diagram korelacyjny ukazany na rysunku 4.14 ze współczynnikiem R ok. 0.9, świadczy o niezłej, aczkolwiek nie perfekcyjnej korelacji między symulowanym kształtem widma, a błędem przy wyznaczaniu wibracyjnej energii reorganizacji.

Na zakończenie, w rozdziale 4.4, Autorka rozpatrzyła problem poszerzenia niejednorodnego jedno- i dwufotonowych pasm absorpcji. Wykorzystana została tu popularna ostatnio metodologia QM/MM, której integralną częścią w niektórych zastosowaniach są symulacje w ramach dynamiki molekularnej. Jak wykazała na przykładzie (uproszczonej) cząsteczki sondy GBC samo podejście RBMD w połączeniu z obliczeniami PE-TDDFT zaniża uzyskane szerokości połówkowe widm jednofotonowych. Nieco lepiej w tym względzie wypada metoda FBMD, jednakże gorzej opisuje ona pozycję pasma. Dopiero uwzględnienie struktury oscylacyjnej pasm poprzez wykonanie konwolucji funkcji Gaussa z wyznaczonym odchyleniem standardowym i widma elektronowego z wysymulowaną strukturą oscylacyjną prowadzi do dobrej zgodności widma teoretycznego i eksperymentalnego. Przy okazji Autorka wyjaśniła przyczyny 13-krotnego wzrostu przekroju czynnego na absorpcję dwufotonową przez sondę GBC pod wpływem koordynacji jonów cynku. W tym miejscu również prosiłbym o komentarz w następujących sprawach. Po pierwsze Autorka pisze „...wartość momentu dipolowego cząsteczki GBC pod wpływem koordynacji wzrasta od 0 do 7.6...” (str. 129). Rozumiem jednak, że skoro obecność anionów chlorkowych nie została uwzględniona (rozdział 4.4.1), to obliczenia dla *cis*-GBC*Zn²⁺ przeprowadzone zostały dla dwudodatniego kationu. Jeśli tak, to war-

tość momentu dipolowego nie jest dokładnie określona, gdyż dla jonów wartość momentu dipolowego zależy od ich położenia w układzie współrzędnych. Na jakiej więc podstawie dokonane było takie porównanie? Po drugie jak czytamy w rozdziale 4.4.1, geometrie cząsteczek z pierwszej grupy zoptymalizowane zostały na poziomie B3LYP/6-31+G(d) przy wykorzystaniu modelu PCM z uwagi na obecność wody jako rozpuszczalnika (rozumiem, że geometria ta nie była zmieniana, przynajmniej w obliczeniach RBMD). Jednakże model polaryzowalnego kontinuum nie najlepiej sprawdza się, gdy w układzie występują oddziaływania specyficzne, jak np. wiązania wodorowe (co ma miejsce również w rozważanym przypadku). Czy były więc podejmowane próby wykorzystania modelu ESM (ang. *Explicit Solvation Model*) np. w celach porównawczych?

Na zakończenie tych rozważań pozwolę sobie zauważyć, iż wyniki zaprezentowane w ocenianej rozprawie jasno pokazują ułomności teorii funkcjonału gęstości w odniesieniu do „trudnych” właściwości oraz to, że na polu rozwoju metod DFT jest jeszcze wiele do zrobienia. W podsumowaniu stwierdzam natomiast, że poziom dysertacji Pani mgr inż. Joanny Bednarskiej jest bardzo wysoki i zasługujący na szczególne uznanie. Rozprawa ma charakter metodologiczno-aplikacyjny (z naciskiem na rozwój metodologii). Natomiast Kandydatka dysponuje bogatym warształem naukowym, ma obszerne rozeznanie w literaturze, potrafi jasno formułować złożone problemy naukowe, realizować ich rozwiązanie i wyciągać właściwe wnioski.

Recenzja rozprawy doktorskiej nie byłaby pełna bez „wytknięcia wpadek” (wszak nie myli się tylko ten, kto nic nie robi). W pracy można doszukać się drobnych potknięć, które pozwolę sobie przytoczyć. W tym miejscu chciałbym jednak stanowczo podkreślić, iż wymienione uchybienia w żaden sposób nie rzutują na moją bardzo wysoką ocenę pracy jako całości. W większości wypadków są to zwykłe pomyłki, które bardzo trudno jest wychwycić autorom tekstów. Natomiast w recenzjach z obowiązku należy się do nich „przyczepić” (co przy okazji powinno mieć wymiar edukacyjny dla doktoranta), zaś ilość tekstu poświęcona temu poniżej wskazuje na „gadulstwo” recenzenta.

Nie jestem przesadnym purystą językowym, mam jednak drobne zastrzeżenia odnośnie interpunkcji (być może część z nich jest dyskusyjna), których – dla zachowania zwięzłości tekstu recenzji – nie będę przytaczał. Dostrzegłem również drobne błędy w składzie pracy, np. znalazłem w tekście tzw. „wdowy” (str. 26 na samym dole; str. 30, na dole, pozycja literaturowa [33]; str. 32, na górze, pozycja literaturowa [70] itd.), czy też „sierotki”, pewne braki spójności w redagowaniu analogicznych fragmentów tekstu

itd. Wydaje się również, że Autorka ma tendencję do zapożyczania słów z języka angielskiego, używając np. terminu „sekcja” zamiast „rozdział/podrozdział”, „koresponduje” zamiast „odpowiada” (choć zgodnie z moją wiedzą słowo „koresponduje” w znaczeniu „odpowiada” kiedyś funkcjonowało w języku polskim), „mod normalny” zamiast „drżenie normalne” itd. Poza tym można spotkać drobne błędy językowe, stylistyczne, czy też niefortunne sformułowania, np. (wymienię kilka znalezionych):

- na stronie 20 pod równaniem (2.5) widnieje „gdzie..., a $\hbar\omega_i$ energią stanu pośredniego”. Powinno zaś być „gdzie..., a $\hbar\omega_i$ – energię stanu pośredniego”;
- na stronie 25 nad równaniem (2.14) jest „Rozpisując wyrażenie intensywność...”; Powinno zaś być „Rozpisując wyrażenie na intensywność...” itd.;
- na stronie 27 w dziewiątej linii od dołu zdanie „...stan pośredni powinien mieć wartość większą niż połowa energii ω_f ” sugeruje iż stan pośredni ma „wartość”, tymczasem ma „wartość energii” lub po prostu „energię”;
- na stronie 29 w czwartej linii od góry zdanie „...tj. różnicy energii równowagowej geometrii...” sugeruje, że „geometria równowagowa” ma „energię”. Tymczasem chodzi tu o „energię cząsteczki o geometrii równowagowej”. Natomiast w ostatnim zdaniu na tej stronie Autorka odwołuje się do „następnego paragrafu” zamiast „następnego rozdziału/podrozdziału”;
- na stronie 59 pod równaniem (4.4) widnieje „wrażanie” zamiast „wyrażenie”;
- na początku rozdziału 4.2.1 zdanie „...zostały zoptymalizowane za pomocą funkcjonału B3LYP...” brzmi dziwnie. Optymalizację prowadzi się za pomocą programów do obliczeń na jakimś poziomie obliczeniowym, np. B3LYP.

W pracy można znaleźć również pomyłki innej natury, np. w równaniach, w opisie metod etc. Kilka przedstawię poniżej.

- W równaniu (2.8) powinno być $e^{i\omega t}$.
- W trzeciej linii pod tabelą 2.1 powinno być TURBOMOLE, tym bardziej, że w samej tabeli w drugiej linii widnieje właśnie nazwa tego pakietu wraz z odnośnikiem literaturowym, a nie DALTON.
- Rysunek 2.4 nie jest do końca poprawny (choć zdaję sobie sprawę, że jest on tylko poglądowy). Parabola (linia granatowa) uzyskana z rozwinięcia krzywej energii potencjalnej w szereg Taylora do drugiego rzędu nie leży całkowicie „wewnątrz” samej krzywej (linia przerywana). Dla x mniejszych od wartości równowagowej jest odwrotnie (to parabola, a nie KEP przecina oś rzędnych). Błąd ten widziałem również w podręcznikach (nie pamiętam jednak, w których). Ponadto

odległość zerowego poziomu oscylacyjnego od minimum na paraboli powinna być równa połowie odległości pomiędzy kolejnymi poziomami.

- Zdanie przed równaniem (2.24) sugeruje, że warunki Eckarta (inaczej, warunki Sayvetza) eliminują sprzężenie Coriolisa. Tymczasem pierwszy warunek eliminuje sprzężenie translacji i rotacji oraz translacji i oscylacji, drugi zaś, definiując w jaki sposób rotujący z cząsteczką układ współrzędnych jest z nią związany, eliminuje tylko jeden z wkładów do energii Coriolisa (a nie cały człon).
- Równania (2.29) i (2.30) nie opisują zależności funkcyjnej (co jest zaznaczone w tekście poprzedzającym), gdyż Autorka użyła w nich wartości równowagowych x_0 oraz x_f .
- Czy na rysunku 2.5 oś odciętych nie powinna być podpisana „... $\times 10^{-4}$ [cm $^{-1}$]” (podobnie jak na rysunkach 4.12 i 4.13)?
- Na stronie 33 (środek tekstu pod rysunkiem) Autorka stwierdza „...zakłada się równość macierzy Hessa...”. Hesjan (w języku polskim piszemy pojedyncze „s” i „j” zamiast „i”) to macierz, którą zdefiniował matematyk Ludwig O. Hesse (a nie Hess, które to nazwisko źle kojarzy się nam, Polakom) i jako taki powinien być nazywany „macierzą Hessego”, a nie „macierzą Hessa”.
- Na stronie 36 w liniach 5 i 6 widnieje trochę dziwne sformułowanie „...w oparciu o macierz z metody Wilsona...”. Którą macierz? Chyba lepiej byłoby uściślić zagadnienie i napisać „...macierz transformacji między współrzędnymi normalnymi a kartezjańskimi wychyleniami atomów z położenia równowagowych...”.
- W równaniach (3.3) i (3.4) symbole r , r' oraz R_α powinny być pogrubione, gdyż oznaczają wektory (to jest standard w literaturze). To samo dotyczy pozostałych równań opisujących metodę DFT, w których symbole te występują. Ponadto w równaniu (3.4) w mianowniku wyrażenia podcałkowego powinno być $|\mathbf{r} - \mathbf{R}_\alpha|$.
- Na stronie 46 w zdaniu na samym dole Autorka stwierdza, że E_{xc} „...to funkcjonał korelacyjno-wymienny zawierający korektę energii kinetycznej, zdefiniowanej dla nieoddziałujących elektronów, w postaci potencjału korelacyjnego...”. Po pierwsze słowo „potencjał” powinno zostać zastąpione słowem funkcjonał (potencjał to pochodna wariacyjna funkcjonału po gęstości, $\hat{v}_{xc} = \frac{\delta E_{xc}}{\delta \rho}$, która występuje w równaniu operatorowym Kohna-Shama). Po drugie zdanie to sugeruje, że człon korelacyjny wynika z zastąpienia w podejściu Kohna-Shama „faktycznej” energii kinetycznej, energią kinetyczną nieoddziałujących elektronów. Oczywiście, w E_{xc} poprawka na energię kinetyczną oddziałujących elektronów powinna

być zawarta, ale nie sposób nie wspomnieć tu o skorelowanym ruchu elektronów („dziura kulombowska”, która nie ma nic wspólnego z $T[\rho]$ i o której $J[\rho]$ nic „nie mówi” oraz „dziura Fermiego”, której podobnie „nie znajdziemy” w $J[\rho]$; o tej ostatniej Autorka pisze jednak w drugiej części zdania).

- Na rysunku 3.1 kolejność szarych prostokątów z napisami GGA i *meta*-GGA z lewej strony drabiny Jakuba powinna być odwrotna.

Jeszcze raz podkreślam, że powyższe uwagi dotyczą drobiazgów. Na zakończenie mogę śmiało stwierdzić, że czytanie tej pracy było dla mnie prawdziwą przyjemnością. W tym miejscu pozostaje mi tylko pogratulować Pani mgr inż. Joannie Bednarskiej wspaniałych wyników, życzyć Jej dalszej udanej kariery naukowej i pozazdrościć Panu Promotorowi wspaniałej Wychowanki.

W podsumowaniu z pełnym przekonaniem stwierdzam, iż przedłożona rozprawa z nadmiarem spełnia formalne i zwyczajowe wymogi niezbędne do nadania stopnia naukowego doktora. Z przyjemnością wnoszę więc o dopuszczenie Kandydatki do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Z równie wielką przyjemnością wnoszę też do Wysokiej Rady Wydziału Chemicznego Politechniki Wrocławskiej o wyróżnienie pracy doktorskiej Pani mgr inż. Joanny Bednarskiej.

Prof. Borowicki

