

**Uzasadnienie wniosku**  
**o Nagrodę Prezesa Rady Ministrów za wyróżniającą się rozprawę doktorską**  
**Pana dr. inż. Konrada Wilczyńskiego**  
**pt. „Teoretyczne badania właściwości fononowych materiałów o strukturze dwuwymiarowej**  
**i ich heterostruktur z uwzględnieniem temperatury sieci krystalicznej”**

Praca doktorska w **dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne.**

Podmiot doktoryzujący: **Politechnika Warszawska, Rada Naukowa Dyscypliny Nauki Fizyczne.**

Data obrony rozprawy: **05.09.2024 r.**

Data nadania stopnia doktora: **26.09.2024 r.**

Rozprawa doktorska Pana dr. inż. Konrada Wilczyńskiego porusza bardzo istotne zagadnienie naukowe z punktu widzenia podstawowych fundamentalnych właściwości fizycznych ciał stałych. Mianowicie, rozważono w niej właściwości drgań sieci krystalicznej w ciałach stałych (opisywanych w fizyce teoretycznej jako wirtualne cząstki – tzw. fonony) ze szczególnym uwzględnieniem ich zależności od temperatury. Co więcej, rozprawa analizuje ww. zagadnienie na przykładzie nowatorskich materiałów z grupy struktur dwuwymiarowych (o grubości kilku atomów), które wyróżnia na tle innych ciał stałych relatywnie duża liczba atomów powierzchniowych, co może istotnie wpływać na właściwości fizyczne tej specyficznej grupy materiałów. Do istotnych atutów wybranych przez autora materiałów dwuwymiarowych należą także bardzo wysoki potencjał aplikacyjny tych struktur, w szczególności w dziedzinach elektroniki i optoelektroniki, a także wciąż stosunkowo niewielka liczba prac poświęcona materiałom dwuwymiarowym (zapoczątkowanych w dużej mierze przez przyznanie nagrody Nobla w 2010 r. za przełomowe badania nad popularnym grafenem – pojedynczą warstwą atomów węgla). Sama rozprawa doktorska uzyskała bardzo pozytywne i wyróżniające opinie u wszystkich trzech recenzentów zewnętrznych oraz została wyróżniona przez Radę Naukową Dyscypliny Nauki Fizyczne Politechniki Warszawskiej.

Wysoce nowatorski i innowacyjny jest nie tylko problem naukowy poruszony w rozprawie doktorskiej kandydata do Nagrody, lecz również sposób i podejście autora do jego rozwiązania. Mianowicie, istotną część rozprawy stanowi szczegółowe i dokładne przedstawienie kluczowego zagadnienia propagacji drgań dowolnej sieci krystalicznej o dowolnej temperaturze, oparte na teoretycznej mechanice kwantowej (przedstawione w Rozdziale 3 oraz Dodatku A rozprawy). Model propagacji fononów, niezbędny do zrealizowania badań, został w dużej mierze opracowany i ściśle uzasadniony przez autora rozprawy, stanowiąc jednocześnie pełne i przystępne podsumowanie dotychczasowych opisów dostępnych w literaturze zagranicznej – niezwykle cenne dla przyszłych naukowców zainteresowanych podjęciem się podobnych badań teoretycznych. Ponadto na szczególną uwagę zasługuje fakt, że autor rozprawy wykorzystał przedstawiony model

teoretyczny do opracowania własnych narzędzi numerycznych pozwalających obliczać żądane właściwości fononowe w rzeczywistych materiałach. Dzięki wysokiemu stopniowi zrozumienia zagadnienia przez kandydata do Nagrody, opracowane przez niego narzędzia (opisane w Rozdziałach 4.2-4.3 rozprawy oraz w Dodatku B) pozwoliły nie tylko istotnie przyspieszyć obliczenia wykonywane w rozprawie, ale także umożliwić ich wykonanie w bardziej złożonych strukturach (wielowarstwowych) – niedostępnych do teoretycznego zbadania w ramach ówczesnie istniejącej metodologii badawczej. To wszystko czyni istotną część badań przedstawionych w rozprawie pionierskimi nie tylko w skali kraju, ale także świata. Zastosowane narzędzia numeryczne, bazujące na ulepszonej przez autora metodologii badań (w szczególności zakładającej jej poszerzenie o dodatkowe efekty fizyczne – mylnie pomijane w dotychczasowej literaturze przedmiotu), pozwoliły też istotnie zwiększyć dokładność otrzymywanych przez autora przewidywań teoretycznych w porównaniu z wynikami opublikowanymi w dotychczasowej (nielicznej) literaturze w tej dziedzinie, powstałej w czołowych ośrodkach zagranicznych. Pozwala to stwierdzić, że rozprawa doktorska kandydata do Nagrody prezentuje bardzo wysoki poziom wiedzy teoretycznej autora w dyscyplinie naukowej nauki fizyczne oraz wyróżniający poziom jego umiejętności w zakresie samodzielnego prowadzenia pracy naukowej.

Do najważniejszych wyników przedstawionej rozprawy doktorskiej, mających istotny wpływ na rozwój dyscypliny naukowej nauki fizyczne, warto zaliczyć przede wszystkim zrozumienie wpływu kluczowych efektów fizycznych (rozszerzalności termicznej i oddziaływań między fononami) na zależności temperaturowe drgań sieci krystalicznej w popularnych materiałach warstwowych – takich jak dwusiarczki molibdenu ( $\text{MoS}_2$ ) i dwusiarczki wolframu ( $\text{WS}_2$ ), o istotnym potencjale aplikacyjnym w dziedzinie elektroniki. Autor rozprawy nie tylko doskonale odtworzył rzeczywiste (eksperymentalne) zależności temperaturowe fononów, ale także jako pierwszy wprost uwzględnił wpływ obecności podłoża pod tymi materiałami (co jest bardzo częste w zastosowaniach). Autor zbadął też dokładnie wpływ liczby warstw na właściwości fononowe (m. in. w wielowarstwowym  $\text{WS}_2$ ), a także zbadął specyficzny przypadek wysoce anharmonicznej struktury dwusiarczku tytanu ( $\text{TiS}_2$ ) – identyfikując dotychczas mało rozpoznane zjawisko fizyczne prowadzące do obserwacji nowych widm w spektroskopii ramanowskiej. Przedstawione badania teoretyczne z pewnością będą mieć kluczowe znaczenie w kontekście przyszłych i bardziej zaawansowanych badań nad materiałami nanostrukturalnymi, w tym nad dwuwymiarowymi – obejmujących bardziej skomplikowane struktury, a także dotyczące badań makroskopowych właściwości fizycznych zależnych od propagacji fononów, takich jak przewodność cieplna.

O wysokiej jakości wyników naukowych przedstawionych w rozprawie świadczą też publikacje w których zostały one przedstawione – w szczególności są to prace w renomowanych zagranicznych czasopismach naukowych z listy JCR, takich jak *Acta Materialia* (IF = 9.4, MNiSW = 200), *Journal of Physical Chemistry C* (IF = 3.3, MNiSW = 140) oraz *Journal of Raman Spectroscopy* (IF = 2.9, MNiSW = 70). Wyniki rozprawy były również prezentowane na licznych konferencjach naukowych, w tym na pięciu konferencjach o zasięgu międzynarodowym w formie referatów ustnych (EMRS 2022-2024, ECOSS-36 oraz GrapheneForUS 2022), przy czym jeden z tych referatów był referatem zaproszonym. Na pełen dorobek publikacyjny autora składa się

obecnie 13 artykułów naukowych (w tym 10 w czasopismach z listy JCR) związanych z różnymi aspektami modelowania zjawisk fizycznych na podstawie pierwszych zasad fizyki (cytowanych 68 razy według bazy Google Scholar). Autor posiada także doświadczenie w realizacji i kierowaniu projektami badawczymi, obecnie koordynując grantem wewnętrznym Young PW. Stanowi to imponujący dorobek dr. inż. Konrada Wilczyńskiego zważywszy na bieżący etap jego kariery naukowej.