

**Recenzja rozprawy doktorskiej
mgr. Pawła Mikołaja Pigłowskiego**

1. Krótka charakterystyka rozprawy

Rozprawa doktorska mgr. Pawła Mikołaja Pigłowskiego zatytuowana "Badanie własności sprężystych strukturalnie zmodyfikowanych kryształów Yukawy za pomocą symulacji komputerowych" zawiera 122 strony, składa się ze streszczenia (abstraktu), sześciu rozdziałów, dodatku oraz spisu literatury. W krótkim streszczeniu przedstawiono główne wyniki rozprawy. Pierwszy rozdział przedstawia aktualny stan badań modelowych poświęconych auksetykom; Autor formułuje w nim dwa główne cele pracy, związane z modelowaniem auksetyczności na poziomie atomowo-molekularnym. Rozdział drugi ma charakter metodologiczny, omówiono w nim potencjał Yukawy, elementy teorii sprężystości, obliczanie podatności sprężystych metodą Monte Carlo oraz współczynnik Poissona. Nowością jest tu wprowadzenie przez Autora parametru charakteryzującego stopień auksetyczności. W rozdziale trzecim przedstawiono wyniki badań dotyczących wpływu polidispersji rozmiarów cząsteczek na własności sprężyste, w tym na stopień auksetyczności, dwuwymiarowych i trójwymiarowych układów Yukawy. Rozdziały czwarty i piąty poświęcono pionierskim badaniom nad właściwościami sprężystymi, w tym auksetycznymi, będącymi rezultatem modyfikacji struktury układów Yukawy na poziomie atomowo-molekularnym. W rozdziale czwartym modyfikacja polega na wprowadzeniu do układu nanowarstw w trzech wybranych płaszczyznach krystalograficznych, w piątym zaś - nanokanałów w trzech wybranych kierunkach krystalograficznych. W każdym z tych przypadków badano współczynnik Poissona w głównych kierunkach krystalograficznych oraz stopień auksetyczności. Otrzymane wyniki są istotne; niektóre z nich omówię w dalszej części recenzji. Dobre podsumowanie wyników zaprezentowanych w rozprawie przedstawiono w rozdziale szóstym.

2. Ocena wagi oraz aktualności rozpatrywanych zagadnień

Rozprawa dotyczy badań teoretycznych (metody fizyki statystycznej - symulacje Monte Carlo - i teorii sprężystości) ważnych i aktualnych zagadnień z dziedziny własności sprężystych, w tym auksetycznych, modelowych układów molekularnych. Wyniki wnoszą istotny wkład zarówno w rozwój metodologii jak i przyczyniają się do głębszego zrozumienia podstaw fizyki auksetyków.

Wyniki prezentowane w rozprawie zostały opublikowane w pięciu bardzo dobrych czasopismach; w trzech z nich doktorant jest pierwszym autorem. Ten dorobek publikacyjny świadczy o wysokim poziomie i wadze badań przeprowadzonych przez mgr. Pigłowskiego i przedstawionych w rozprawie doktorskiej. Należy przy tym wspomnieć, że doktorant jest członkiem wiodącej w świecie grupy zajmującej się modelowaniem teoretycznym auksetyków, kierowanej przez K.W. Wojciechowskiego, autora pionierskiej pracy w tej dziedzinie, oraz K.V. Tretiakowa, promotora rozprawy.

3. Ocena merytoryczna wybranych części rozprawy

W mojej ocenie najważniejsze wyniki rozprawy zawarte są w czwartym i piątym rozdziale. Należy tu omówić dwa aspekty: metodologiczny i poznawczy.

Z punktu widzenia metodologii zaproponowano pionierskie podejście do badania właściwości sprężystych układów kompozytowych typu gość-gospodarz oparte na klasycznej inżynierii molekularnej. Tworzy ono schemat modelowania dający w wyniku współczynniki Poissona w głównych kierunkach krystalograficznych, co z kolei umożliwia badanie stopnia auksetyczności układu przy pomocy wprowadzonego przez Autora oryginalnego parametru opisującego średni stopień auksetyczności. Całość ustala, w moim odczuciu, bardzo wysoki standard dla badań tego typu. Zastosowanie tego podejścia dało istotne wyniki o których poniżej. Przedstawiony aparat modelowania może być użyty do badania innych modeli kompozytowych bazujących na cząsteczkach Yukawy; łatwo zaproponować istotne uogólnienia badanych w pracy modeli. Istotą stosowanej metodologii jest modyfikacja na poziomie atomowo-molekularnym matrycy (cząsteczki Yukawy) poprzez wprowadzenie obojętnych cząsteczek tworzących, w zasadzie dowolne, uporządkowane struktury przestrzenne. W recenzowanej pracy badano nanowarstwy i nanokanały, ale metoda ma większy potencjał. Symulacje Monte Carlo w układzie NpT pozwalają obliczyć podatności sprężyste za pomocą metody Parrinello-Rahmana.

Zaproponowany formalizm pozwala na wyznaczenie szeregu ilościowych wyników dotyczących stałych sprężystych. W moim odczuciu ważniejszy jest potencjał tego podejścia przy próbach uzyskania wyników jakościowych, jako takich dających głębszy wgląd w fizykę auksetyków i pozwalający na tworzenie obrazu fizycznego badanych zjawisk sprężystych. Oczywiście, wyniki jakościowe bazują na wynikach ilościowych. W tej pracy, w moim odczuciu (przepraszam za kolokwializm) ilość przechodzi w jakość, co nieczęsto ma miejsce nawet w bardzo dobrych pracach naukowych.

Główny wynik tej części pracy to pokazanie, że modyfikacja struktury matrycy Yukawy za pomocą elektrycznie obojętnych atomów gości pozwala nie tylko na ilościową modyfikację parame-

trów sprężystych ale, w pierwszej kolejności, na efektywne sterowanie właściwościami auksetycznymi układów Yukawy za pomocą kilku parametrów: koncentracji atomów elektrycznie obojętnych, długości ekranowania w potencjale Yukawy z twardym rdzeniem oraz typu struktury krystalograficznej atomów gości. Systematycznie badano właściwości sprężyste kryształów Yukawy z nanowarstwami zorientowanymi w płaszczyznach (010), (110) oraz (111). Najważniejszy wynik tej części to pokazanie, że wprowadzenie nanowarstw atomów gości może powodować zarówno osłabienie auksetyczności, całkowite jej usunięcie w całej płaszczyźnie, jak i pojawienie się nowych kierunków auksetycznych. W podobny sposób badano systematycznie właściwości sprężyste układów Yukawy z nanokanałami. Pokazano tu, oprócz oczekiwanego już efektu wzmocnienia auksetyczności, występowanie nowego zjawiska - pojawienie się auksetyczności w całej płaszczyźnie.

W drugiej części pracy Autor zajął się modelowaniem wpływu polidispersji rozmiarów cząsteczek Yukawy na właściwości sprężyste dwuwymiarowych i trójwymiarowych kryształów Yukawy. Badano systematycznie zależności modułów sprężystości w funkcji długości ekranowania oraz polidispersji. Najistotniejszy, w moim odczuciu, rezultat tej części ma znów charakter jakościowy - zwiększenie stopnia auksetyczności (w pewnych kierunkach) w efekcie zwiększenia stopnia polidispersji.

Mam dwie uwagi. Po pierwsze, jak wyglądają niepewności wynikające ze stosowania uśrednienia wyników niezależnych symulacji (na przykład, na Rys. 3.2)? Po drugie, wydaje mi się, że zapis wzoru (2.77) jest nieprecyzyjny - górna granica całkowania nie jest wartością bezwzględną współczynnika Poissona, a wynika z rozwiązania równania wykorzystującego $\bar{\nu}_-(\vartheta, \varphi)$. Towarzyszące temu wzorowi zdanie "jest średnią po ujemnych wartościach współczynnika Poissona..." jest co najmniej niejasne.

4. Ocena innych aspektów rozprawy

Organizacja rozprawy i jej szata graficzna są bardzo dobre. Układ tekstu jest przejrzysty. Rysunki są wykonane bardzo starannie. Jedynie w przypadku Rys. 4.13 nie widać efektu o którym Autor pisze na str. 67. Na rysunku 5.10 należałoby użyć innych kolorów - nie widać, że $h_{xz} = 0$.

Język rozprawy jest prosty i jednocześnie dobry. Przyjemnie zaskakuje brak niedociągnięć typograficznych - znalazłem jedynie kilka "literówek" (w streszczeniu, tytule rozdziału 2.1, na str. 29, 31, 40, 44, 45, 47, 49, 50, 79, 102 i 112). Czy w tytule pracy nie powinno być "właściwości" zamiast "własności"? Oraz: cząstki czy cząsteczki Yukawy?

Autor nie ustrzegł się drobnych nieścisłości; wątpliwości budzą poniższe sformułowania. I tak,

stwierdzenie “potencjał kontaktowy, który jest równy pracy...” (str. 20) jest nieprecyzyjne. I dalej, co oznacza skrót “csc” we wzorze (2.66)? Na str. 36 powinno być “sferycznych” a nie “biegunowych”. Na str. 39 powinno być “trójkątnej” a nie “heksagonalnej”. Podpis do Rys. 31: co oznacza zwrot “najlepsze dopasowania”? Jak wyglądają przy tym niepewności estymacji parametrów? Na str. 64 przy opisie Rys. 4.11 należałoby dodać “i od kąta α ”. Opis pod Rys. 4.17: “Układ po obrocie o macierz R ” jest nieudany! I dalej: zapis wzoru (4.9) sugeruje, że macierz obrotu jest symetryczna. Czy jest to poprawne?

Powyższe niedociągnięcia nie mają żadnego wpływu na bardzo pozytywną ocenę pracy.

5. Wniosek

Doktorant otrzymał ważne wyniki, które zostały opublikowane w bardzo dobrych czasopismach. Doktorant wykazał się głęboką znajomością technik symulacyjnych i wybranych działów fizyki teoretycznej.

Uważam, że recenzowana rozprawa mgr. Pawła Mikołaja Pigłowskiego zatytułowana “Badanie własności sprężystych strukturalnie zmodyfikowanych kryształów Yukawy za pomocą symulacji komputerowych” spełnia ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim. Wnoszę o dopuszczenie mgr. Pawła Mikołaja Pigłowskiego do dalszych etapów obrony.

Ponadto, stwierdzam że:

- Wyniki rozprawy wnoszą istotny (miejscami pionierski) wkład do fizyki statystycznej układów auksetycznych.
- Wyniki rozprawy z dużym nadmiarem spełniają merytoryczne wymagania stawiane rozprawom doktorskim.
- Jest to jedna z najlepszych rozpraw doktorskich, jakie recenzowałem.

Biorąc powyższe pod uwagę, wnoszę o wyróżnienie rozprawy mgr. Pawła Mikołaja Pigłowskiego.

A. C. Mj