

Zielona Góra, 28.01.2018.

dr hab. Mirosław R. Dudek, prof. UZ
Uniwersytet Zielonogórski
Wydział Fizyki i Astronomii
ul. Szafrana 4a, 65-516 Zielona Góra

Recenzja rozprawy doktorskiej pt. „Badanie własności sprężystych strukturalnie zmodyfikowanych kryształów Yukawy za pomocą symulacji komputerowych” napisanej przez Pawła M. Pięłowskiego.

Przedstawiona do recenzji praca doktorska ma charakter pracy teoretycznej. Tematyka badawcza pracy mieści się w zakresie fizyki sprężystości i fizyki materiałowej. Opiera się ona na pięciu publikacjach dotyczących kryształów Yukawy dla których pokazana została możliwość kontroli ich własności mechanicznych po odpowiednim zmodyfikowaniu struktury przez wprowadzenie monowarstw lub nanokanałów. Publikacje ukazały się w bardzo dobrych czasopismach fizycznych i czasopismach dotyczących fizyki materiałowej. Są to:

- 1) J. W. Narojczyk, P. M. Pięłowski, K. W. Wojciechowski, K. V. Tretiakov, *Elastic properties of mono-and polidisperse two-dimensional crystals of hard-core repulsive Yukawa particles*, Physica Status Solidi B 252, 1508, (2015),
- 2) K. V. Tretiakov, P. M. Pięłowski, H. Hyzorek, K. W. Wojciechowski, *Enhanced auxeticity in Yukawa systems due to introduction of nanochannels in [001]-direction*, Smart Materials and Structures 25, 054007, (2016),
- 3) P. M. Pięłowski, K. W. Wojciechowski, K. V. Tretiakov, *Partial auxeticity induced by nanoslits in the Yukawa crystal*, Physica Status Solidi – Rapid Research Letters 10, 566 (2016),
- 4) P. M. Pięłowski, J. W. Narojczyk, K. W. Wojciechowski, K. V. Tretiakov, *Auxeticity enhancement due to size polidispersity in fcc crystals of hard-core repulsive Yukawa particles*, Soft Matter 13, 7916 (2017),
- 5) P. M. Pięłowski, J. W. Narojczyk, A. A. Poźniak, K. W. Wojciechowski, K. V. Tretiakov, *Partial auxeticity in Yukawa systems with periodic arrays of nanolayers in the (111) crystallographic plane*, Materials 10, 1338 (2017).

Rozprawa doktorska składa się z sześciu rozdziałów: Wprowadzenia, rozdziału z podstawowymi definicjami i opisem użytych metod teoretycznych, trzech rozdziałów zasadniczych rozprawy opartych o wymienione wyżej pięć publikacji, rozdziału będącego podsumowaniem wyników oraz rozdziału będącego Dodatkiem. Rozprawa doktorska została napisana pod kierunkiem promotora dr hab. Konstantina V. Tretiakova z Instytutu Fizyki Molekularnej PAN w Poznaniu.

Ocena poszczególnych rozdziałów rozprawy doktorskiej, przedstawienia w nich wyników badawczych i wagi otrzymanych wyników.

Rozdział „Wprowadzenie”.

W tym rozdziale doktorant przedstawił główne cele swojej dysertacji. Można byłoby krótko je określić jako nawiązanie do pierwszego modelu teoretycznego opisującego układy atomowo-molekularne o ujemnym współczynniku Poissona wprowadzonego przez prof. K. W. Wojciechowskiego (Mol. Phys. 61, 1247 (1987)) i ważnej dla tej rozprawy publikacji prof. K. V. Tretiakova i prof. K. W. Wojciechowskiego (Physica Status Solidi B, 251, 387 (2014)) w której pokazano możliwość pojawienia się własności auksetycznych w kryształach o strukturze fcc z oddziaływaniami Yukawy. Rozprawa dotyczy bowiem układów auksetycznych na poziomie atomowo-molekularnym i w tym przypadku są to krystaliczne fazy koloidów gdzie oddziaływania pomiędzy cząstkami koloidu opisywane są przy pomocy potencjału Yukawy.

Główne cele, które postawił doktorant to:

1. Zbadanie wpływu polidispersyjności rozmiaru cząstek tworzących strukturę kryształu Yukawy na jego własności sprężyste,
2. Zbadanie wpływu modyfikacji struktury kryształu Yukawy na jego własności sprężyste po wprowadzeniu do niego nanowarstw cząstek o innych parametrach niż cząstki koloidu,
3. Zbadanie wpływu modyfikacji struktury kryształu Yukawy na jego własności sprężyste po wprowadzeniu do niego nanokanałów.

Cele te zostały osiągnięte w kolejnych rozdziałach pracy doktorskiej i w wymienionych wyżej publikacjach.

Uwaga 1: We Wprowadzeniu jest bardzo dużo odnośników literaturowych a oczekiwałbym szerszego opisu uzasadnienia dlaczego kryształy Yukawy są ważne dla zastosowań i co wnoszą

wyniki tej pracy do obecnego stanu wiedzy nt kryształów Yukawy, stabilności ich faz itd. Jednocześnie chcę podkreślić, że wyniki badań teoretycznych przedstawione w pracy doktorskiej otwierają nowe możliwości dla tych fascynujących materiałów jakimi są kryształy Yukawy. Na przykład, doktorant wspomniał we Wprowadzeniu o ogólniejszym kontekście dla swoich modeli poprzez odniesienie się do materiałów kompozytowych.

Uwaga 2.: Uważam, że lepiej byłoby aby w spisie literatury były umieszczone tytuły publikacji.

Rozdział „Podstawy teoretyczne”.

W rozdziale tym doktorant zawarł niezbędne informacje dotyczące podstawowych pojęć i definicji niezbędnych do zrozumienia modeli teoretycznych dla badanych przez siebie kryształów Yukawy.

Moje uwagi do tego rozdziału to:

Uwaga 1: brakuje mi jawnie napisanej definicji długości Debye’a z której doktorant korzystał przy definicjach potencjału Yukawy dla konkretnych modeli teoretycznych. Długość Debye’a zależy od frakcji objętościowej cząstek koloidu ale zależność tą można pominąć dla małych frakcji objętościowych cząstek koloidu. Dlatego mam pytanie: jakie zakresy frakcji cząstek koloidu były brane w symulacjach komputerowych?

Rozdział „Układy Yukawy z polidispersją rozmiarów cząstek”.

W rozdziale przedstawiono wyniki symulacji Monte Carlo dla polidispersyjnych kryształów Yukawy w dwóch i trzech wymiarach przestrzennych. Wyniki te wprost sugerują że wartości współczynników Poissona mogą zmieniać się w zależności od długości ekranowania. Jednym z najciekawszych wyników tego rozdziału było zaobserwowanie możliwości uzyskiwania różnych własności auksetycznych kryształów koloidalnych poprzez zmianę polidispersji rozmiarów cząstek koloidu, w szczególności pojawienie się nowych kierunków krystalograficznych z ujemnym współczynnikiem Poissona. Odkrycie to może okazać się istotne dla szeregu zastosowań, tam gdzie mamy do czynienia z krystalicznymi koloidami, np. z kryształami fonicznymi na bazie koloidu do kontroli wielkości przerw energetycznych w zadanych kierunkach krystalograficznych. Tutaj wyniki symulacji

komputerowych doktoranta świadczące o jego olbrzymiej wiedzy nt modelowania deformacji struktur krystalicznych pozwoliłyby na postawienie pewnych warunków brzegowych dla eksperymentu.

Ciekawym pomysłem jest wprowadzenie miary auksetyczności przy porównywaniu własności auksetycznych badanych układów Yukawy.

Uwaga 1: Jakie kryteria były wzięte dla wybrania czasów termalizacji (dochodzenia do równowagi termodynamicznej) w przeprowadzonych symulacjach Monte Carlo? Na str. doktorant napisał o „równowagowaniu” układu co trochę dziwnie brzmi w języku polskim.

Rozdział „Kryształy Yukawy z nanowarstwami”.

Rozdział dotyczy własności sprężystych kryształów Yukawy, gdzie cząstki koloidu w wybranej płaszczyźnie sieciowej, jednej lub kilku, zastępuje się w modelu twardymi kulami. Uważam ten pomysł za bardzo obiecujący dla potencjalnych zastosowań. Doktorant napisał w Podsumowaniu o pionierskim podejściu „do poszukiwaniu mechanizmów prowadzących do własności auksetycznych, jakim jest modyfikacja struktury na poziomie atomowym. Całkowicie zgadzam się z tym sformułowaniem. Dodałbym, że uzyskane wyniki mają ogólniejszy charakter. Najważniejsze z nich dotyczące struktur koloidalnych fcc to:

1. zauważenie że wprowadzenie nanowarstwy (010) twardych kul powoduje pojawienie się nowych kierunków auksetycznych w płaszczyźnie nanowarstwy.
2. wprowadzenie nanowarstwy (110) twardych kul usuwa auksetyczność w płaszczyźnie OXY,
3. wprowadzenie nanowarstw (111) twardych kul prowadzi do osłabienia auksetyczności
4. w przypadku zamiany kul na cząstki koloidu a cząstek koloidu na kule własności auksetyczne kryształu z kul zostają wzmocnione.

Rozdział „Kryształy Yukawy z nanokanałami”.

W tym przypadku w wybranym kierunku krystalograficznym struktura kryształu Yukawy modyfikowana jest pojawieniem się nanokanału – cząstki koloidu zastąpione zostają w modelu przez twarde kule. Zbadano własności sprężyste takich kryształów z nanokanałami w kierunku [001], [110], [111]. Wprowadzenie nanokanałów w kierunku [001] lub [111] powoduje wzmocnienie istniejących własności auksetycznych a w kierunku [110] przyczynia się do pojawienia się auksetyczności w całej płaszczyźnie OXY.

Wyniki dotyczą pracy opublikowanej w 2017 roku. Niewątpliwie jej wyniki są ogólniejsze i podobnie jak w przypadku z nanowarstwami wykraczają daleko poza fizykę kryształów Yukawy jeśli chodzi o obserwacje własności sprężystych.

Rozdział „Podsumowanie i wnioski”.

W rozdziale tym doktorant podsumował otrzymane wyniki cząstkowe z poszczególnych rozdziałów co pozwala szybko ocenić wartość pracy doktorskiej i jej nowatorskość. Rozdział ten uzupełniony jest Dołącznikiem zawierającym wzory na współczynnik Poissona w dowolnym kierunku krystalograficznym dla kryształu o symetrii jednoskośnej i trygonalnej.

Podsumowując, uważam, że przedstawiona do oceny rozprawa doktorska spełnia ustawowe warunki stawiane przed rozprawami doktorskimi. Praca oparta jest na publikacjach doktoranta które są bardzo ważne ze względu na otrzymane wyniki symulacji komputerowych dla grup pracujących zarówno nad metamateriałami i materiałami auksetycznymi i dla grup pracujących w tematyce związanej z kryształami Yukawy. Prace są cytowane.

Proszę o dopuszczenie rozprawy doktorskiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Jednocześnie wnioskuję o nagrodę dla tej rozprawy jako rozprawy wyróżniającej. Jako uzasadnienie chciałbym podkreślić, że otrzymane wyniki pokazują nowe nieznane wcześniej możliwości wykorzystania własności sprężystych kryształów Yukawy poprzez modyfikację ich struktury.

Miroslaw Duda