



dr hab. Michał Banaszak, prof. UAM  
Wydział Fizyki  
Uniwersytet im. A. Mickiewicza  
ul. Umultowska 85  
61-614 Poznań  
e-mail: [michal.banaszak@amu.edu.pl](mailto:michal.banaszak@amu.edu.pl)  
Tel.: 61 829 5065

Poznań, 11 sierpnia 2015

### Recenzja

**rozprawy doktorskiej mgr. inż. Sławomira Pieprzyka pt.: „Metody kontroli temperatury oraz wyznaczenie własności termodynamicznych układu miękkich sfer w symulacjach Dynamiki Molekularnej”.**

Obliczenia numeryczne na fundamencie praw fizyki statystycznej są jedną z podstawowych metod badawczych w fizyce, chemii oraz inżynierii chemicznej. Szczególnie ważną metodą obliczeniową jest dynamika molekularna, która w swej pierwotnej i najprostszej postaci sprowadza się do numerycznego rozwiązywania równań ruchu dla modelowych układów molekularnych składających się z  $N$  molekuł, gdzie  $N$  zwykle rzędu od  $10^2$  do  $10^6$ . Ponieważ  $N$  jest wiele rzędów wielkości mniejsze od liczby Avogadro, liczne wysiłki badawcze zmierzają do wykorzystania zaawansowanych algorytmów obliczeniowych oraz przetwarzania równoległego z wykorzystaniem wielu procesorów dla zwiększenia możliwego  $N$ . Warto zauważyć, że Martin Karplus, Michael Levitt oraz Arieh Warshel (badacze zajmujący się tą tematyką) zostali wyróżnieni w roku 2013 nagrodą Nobla z chemii za „za rozwój wieloskalowych modeli dla złożonych układów chemicznych”. Oprócz zwiększania liczby symulowanych molekuł, jednym z podstawowych wyzwań w obliczeniach metodą dynamiki molekularnej jest kontrolowanie mierzalnych wielkości

termodynamicznych, a w szczególności kontrolowanie temperatury poprzez stosowanie tak zwanych termostatów. W przedstawionej mi do recenzji dysertacji Doktorant przedstawia wyniki swych badań dotyczących stworzenia i przetestowania nowego termostatu, który oparty jest na szeroko stosowanym podejściu Nosego i Hoovera oraz na stosunkowo nowym parowym termostacie Allena i Schmida, lecz wykorzystującego temperaturę konfiguracyjną (to znaczy określaną poprzez położenia molekuł) zamiast temperatury kinetycznej (to znaczy określaną poprzez prędkości molekuł). Ponadto Pan mgr inż. Pieprzyk wykorzystuje formalizm transformaty Laplace'a do wyznaczenia dokładnych wzorów na wielkości termodynamiczne układu cząsteczek oddziałujących za pomocą potencjału odwrotnie potęgowego. W opinii recenzenta należą się słowa uznania Doktorantowi, Panu mgr. inż. Sławomirowi Pieprzykowi, oraz Promotorowi, Panu prof. IFM PAN dr. hab. Arkadiuszowi Brańce, za wybór tematyki, która jest unikalna w Polsce. Przedstawione w rozprawie doktorskiej wyniki badań są z całą pewnością fundamentalne, przydatne i ciekawe.

Rozprawa, która została przygotowana w Instytucie Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk w Poznaniu, jest poprawnie napisana klarowną polszczyzną, zawiera 134 strony, 5 rozdziałów, 3 dodatki, wyczerpującą listę odnośników literaturowych oraz spis tabel i rysunków. Zawiera również listę skrótów i oznaczeń, co bardzo ułatwia czytanie. W rozdziale pierwszym wprowadzono tematykę badawczą, przedstawiono cele badawcze oraz omówiono układ dysertacji doktorskiej. Jak się dowiadujemy już w pierwszym zdaniu:

*Przedmiotem rozprawy doktorskiej są nowe metody obliczeniowe fizyki oparte na zespołach mechaniki statystycznej (mikrokanonicznym i kanonicznym). Głównym celem rozprawy jest zaproponowanie nowej deterministycznej metody kontroli temperatury (termostatu deterministycznego) opartej na parach cząstek oraz nowego podejścia do określania własności termodynamicznych układu cząsteczek oddziałujących za pomocą potencjału odwrotnie potęgowego.*

Zatem dzięki temu lapidarnemu stwierdzeniu już od samego początku wiemy jaki jest cel rozprawy.



Z prawdziwą przyjemnością przeczytałem rozdział drugi, który przedstawia dynamikę molekularną oraz powiązane z nią metody kontroli temperatury, w tym termostaty Andersena, Gaussowski, Berendsena, Nosego, oraz Nosego-Hoovera. Doktorant zapoznaje czytelnika w tym rozdziale z pojęciem temperatury konfiguracyjnej. Moim zdaniem cała ta część rozprawy ma ogromny walor edukacyjny i może być wykorzystana w przyszłości jako materiał dydaktyczny dla magistrantów i doktorantów. Do tej pory brakowało w języku polskim równie wnikliwego opracowania.

W rozdziale trzecim przedstawione są główne metody i wyniki recenzowanej rozprawy. Najpierw Doktorant przedstawia szczegółowo wybrane termostaty deterministyczne oraz wprowadza nowy termostat parowy, który zostaje oznaczony skrótem NHASf na cześć Nosego, Hoovera, Allena i Schmida. Następnie opisane jest testowanie termostatu NHASf na przykładzie układu cząstek oddziałujących potencjałem Lennarda Jonesa. Stosując zarówno nowy termostat jak i inne wybrane termostaty mgr inż. Pieprzyk oblicza wiele właściwości termodynamicznych, strukturalnych oraz dynamicznych (jak na przykład lepkość płynu) w płynie Lennarda-Jonesa. Warto podkreślić, że nowy termostat zachowuje całkowity moment pędu co pozwala na zastosowanie tej metody do kontroli temperatury układów izolowanych o skończonych rozmiarach.

W rozdziale czwartym została przedstawiona metoda (oparta na transformacji Laplace'a) wyznaczania wielkości termodynamicznych układu cząstek oddziałujących za pomocą potencjału odwrotnie potęgowego. Do najważniejszych wyników otrzymanych za pomocą tej metody i przedstawionych w rozprawie można zaliczyć wykazanie, że współczynnik Joule'a-Thomsona jest zawsze ujemny oraz występowanie trzech różnych obszarów miękkości. Ciekawym wynikiem jest również pokazanie, że znane i stosowane kryteria krzepnięcia, takie jak np. kryterium Hansena-Verleta, nie obowiązują w płynie cząstek oddziałujących za pomocą potencjału odwrotnie potęgowego.

W rozdziale piątym podsumowano główne wyniki całej rozprawy. Moim zdaniem do najważniejszych wyników rozprawy należy zaliczyć:

- wyczerpujący i wnikliwy opis stosowanych metod,
- zaproponowanie i gruntowne przetestowanie nowego termostatu,
- stworzenie nowego podejścia do określania własności termodynamicznych układu cząsteczek oddziałujących za pomocą potencjału odwrotnie potęgowego.

W podsumowaniu chciałbym podkreślić, że otrzymane i omówione w niniejszej rozprawie wyniki mają, moim zdaniem, bardzo wysoką rangę naukową w obszarze symulacji molekularnych i dlatego należy się spodziewać, że publikacje je zawierające, spotkają się z dużym oddźwiękiem w literaturze światowej.

### **Konkluzja**

Z pełnym przekonaniem stwierdzam, że rozprawa doktorska mgr. inż. Sławomira Pieprzyka pt.: „Metody kontroli temperatury oraz wyznaczenie własności termodynamicznych układu miękkich sfer w symulacjach Dynamiki Molekularnej” spełnia ustawowe wymogi dotyczące prac doktorskich i dlatego wnioskuję o jej przyjęcie i dopuszczenie do publicznej obrony. Jednocześnie ze względu na wysoką wartość naukową rozprawy wnoszę o jej wyróżnienie.

*Mieczysław Baranach*