

Prof. dr hab. Krzysztof Parliński  
Instytut Fizyki Jądrowej, PAN, Kraków

**Recenzja rozprawy habilitacyjnej „Symulacje komputerowe własności sprężystych wybranych układów modelowych i poszukiwanie mechanizmów auksetyczności” dra Konstantina Tretiakova**

Dr Konstantin Tretiakov jest absolwentem Homelskiego Państwowego Uniwersytetu Technicznego. Stopień doktora uzyskał w Instytucie Fizyki Molekularnej, PAN, za „Badanie stabilności mechanicznej i termodynamicznej modelowych układów wielu ciał za pomocą symulacji komputerowych”. Uzyskanie stopnia doktora poprzedziło przyznanie grantu promotorskiego.

Doktorat został wyróżniony Nagrodą Dyrektora IFM, PAN. W latach 2002 – 2004 dr Tretiakov przebywał na stażu naukowym w Grupie Materii Skondensowanej w Międzynarodowym Centrum Fizyki Teoretycznej w Trieście, gdzie zajmował się symulacjami komputerowymi przewodnictwa cieplnego stałego argonu w funkcji ciśnienia i temperatury. Po powrocie z Triestu zajmuje się w latach 2005- 2006 modelami przejawiającymi ujemny współczynnik Poisson’a. W dwu następnych latach przebywa na Uniwersytecie Northwestern, zajmując się układami samoorganizującymi się. Zaprezentowano wówczas model kooperatywnej adsorpcji nanocząstek na powierzchni krzemionki, pozwalający na wyjaśnić fotoprzewodnictwo w warstwie nanocząstek. Praca została opublikowana w czasopiśmie Nature. Również kierował jednym grantem i był zwykle głównym wykonawcą w pięciu innych grantach. Wygłaszał Referaty na Konferencjach i proszonych seminariach. Opublikował 28 publikacji w tym 22 z listy filadelfijskiej. Liczba cytowań bez autocytowań wynosi 148, lub inaczej liczba cytowań bez autocytowań i bez cytowań współautorskich wynosi 89. Działalność dydaktyczna ograniczyła się do opieki nad dwoma doktorantami. Brak wzmianki o wykładach, lub innych zajęciach dydaktycznych. W skład rozprawy habilitacyjnej wchodzi dziewięć publikacji. Wszystkie one dotyczą różnych aspektów współczynnika Poissona wyznaczonego dla wielu rodzajów modeli matematycznych.

Badania naukowe dr Tretiakova koncentrują się około grupy materiałów, tzw. *auksetyków*, cechujących się ujemnym współczynnikiem Poissona (**WP**). Ponieważ dla większości materiałów jego wartość jest dodatnia, więc pewne zainteresowanie wywołuje fakt, że niektóre materiały posiadają jednak ujemny WP. Powstaje zatem pytanie: **jaka musi być budowa i oddziaływania międzyatomowe w kryształach posiadającym ujemny WP?** Odpowiedzi na to pytanie szuka się na trzy sposoby: 1. badanie jednostek molekularnych zdolnych do utworzenia ujemnego WP; 2. badanie bardziej złożonych struktur na

poziomie mezo- i makroskopowym; 3. analiza warunków zewnętrznych mogących doprowadzić do ujemnego WP. To pytanie łączy też wszystkie prace wchodzące w skład rozprawy.

Oświadczenia współautorów wskazują na dominującą lub istotną rolę habilitanta we wszystkich publikacjach wchodzących w skład rozprawy.

Autor podszedł do zagadnienia systematycznie i w pierwszej kolejności badał własności sprężyste typowych modeli. Najprostszym jest model twardych dysków. Obliczono dla niego (praca H1) stałe elastyczne i WP, wykorzystując dwie metody. W zasadzie wyniki są w dobrej zgodności z danymi literaturowymi. Drugim (praca H2) jest trójwymiarowy model twardych kul. Wyznaczono dla niego stałe sprężyste, asymptotyczne zachowanie równania stanu, i zaobserwowano obniżenie WP o około 40% w porównaniu do modelu statystycznego w  $T=0K$ . Pokazano również, że wprowadzenie wakancji prowadzi do zwiększenia WP. Trzecim są modele z miękkim potencjałem oddziaływania. W tych modelach potencjał oddziaływania zanika z odległością w zależności od potęgi  $n$ . Dla twardych oddziaływań  $n$  jest duże, podczas gdy dla miękkich –  $n$  jest małe. W ramach tego podejścia badano układ miękkich dysków i miękkich kul. Dla miękkich dysków (praca H3) pokazano, że przy stałej temperaturze i ciśnieniu WP może być obniżony przez zwiększenie parametru  $n$ . Dla układu miękkich kul (praca H4) zbadano własności sprężyste krystalicznej struktury fcc. Jednym z wyników jest stwierdzenie, że WP jest ujemny w kierunku  $[110]$  (prostopadły), dla dowolnej temperatury i parametru miękkości ( $1/n$ ). Wreszcie czwartym, jest grupa modeli układów koloidalnych, granulatów, nanocząstek wykazujących polidispersję rozmiaru cząstek. Badania przeprowadzone na modelach miękkich dysków wskazały, że wartości WP binarnych i polidispersyjnych miękkich dysków są bardzo zbliżone i niezależne od temperatury (praca H5).

Pozostałe prace poświęcone zostały konstrukcji i analizie modeli prowadzących do ujemnych WP. Rozważano modele dwu- i trójwymiarowe.

Te układy mają izotropowe własności sprężyste (praca H7). Tak więc badano model twardych dimerów ułożonych w dwuwymiarowej strukturze aperiodycznej. Trimery, podobnie jak dimery, tworzą fazę krystaliczną i aperiodyczną. Okazało się, że w granicy gęstego upakowania, fazy twardych trimerów cyklicznych posiadają ujemny WP.

Wydzielono dwa pozostałe modele multimetrów: tetramerów (5 kul) i heptamerów (7 kul), ponieważ posiadają one anizotropowe własności sprężyste (prace H8, H9). Układy te mają urozmaicony diagram fazowy. Dla nich są obserwowane fazy z porządkiem translacyjnym i nieporządkiem orientacyjnym. Nieporządek orientacyjny może się zamienić na prawie swobodną rotację. Autorzy twierdzą, że przejście fazowe z fazy z nieporządkiem do fazy rotującej da się precyzyjnie zlokalizować za pomocą WP. Pokazano, że te układy posiadają fazy w których WP jest ujemny.

W dorobku naukowym jest 11-cie publikacji z listy filadelfijskiej. Początkowe publikacje dotyczą w dużej części rozszerzenia metody Monte Carlo o sposoby wyliczania własności sprężystych modeli. Dwie prace [12,13] napisane z S.Scandolo dotyczą technicznie ważnego problemu przewodnictwa cieplnego. Dla najprostszego kryształu argonu, dla którego znany jest fenomenologiczny potencjał oddziaływania, przeprowadzono symulacje dynamiki molekularnej. Wyniki symulacji wykorzystano do wyliczenia czasowej funkcji korelacji strumienia ciepła, która poprzez wzór Grena-Kubo pozwala wyliczyć współczynnik przewodnictwa cieplnego.

Stwierdzono, że rozmiar symulowanego układu nie wpływa na wartość ciepła przewodnictwa, oraz, że czas życia fononów, istotnie wpływający na ciepło przewodnictwa, ma dwie składowe: szybką – krótkoczasową i wolną – długoczasową. Ilościowa zgodność obliczonego i zmierzonego współczynnika przewodności cieplnej jest bardzo dobra (poniżej 20%). Ciepło właściwe można również wyliczyć bazując na teorii kinetycznej. Autorzy przeprowadzili ten rachunek, wymagający jednak szeregu fenomenologicznych przybliżeń, i stwierdzili, że w przypadku krystalicznego argonu zgodność obu typów rachunków jest dobra.

Podsumowując stwierdzam, że rozprawa habilitacyjna oraz dorobek naukowy dra Konstantin Tretiakov są bardzo dobre. Spełniają one ustawowe (Ustawa z dnia 14 marca 2003r. wraz z poprawkami z 2005r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz stopniach i tytule w zakresie sztuki) i zwyczajowe wymagania stawiane w przewodzie habilitacyjnym i wnoszę o dopuszczenie dra Tretiakova do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.



Prof. dr hab. Krzysztof Parliński

Kraków, 28 września 2010r.