

Prof. dr hab. Michał Banaszak
Wydział Fizyki
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
ul. Umultowska 85
61-614 Poznań
e-mail: michal.banaszak@amu.edu.pl
telefon: 61-8295065

Poznań, 15 grudnia 2018

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. inż. Krzysztofa Hyżorka pt. „Wpływ ograniczeń geometrycznych i polidispersji rozmiarów cząstek na przewodnictwo cieplne układów modelowych”

Przedstawiona mi do recenzji dysertacja doktorska dotycząca wpływu ograniczeń geometrycznych i polidispersji rozmiarów cząstek na przewodnictwo cieplne układów modelowych została przygotowana przez Pana mgr. inż. Krzysztofa Hyżorka pod kierunkiem Pana Prof. IFM PAN dr. hab. Konstantina Tretiakova w Instytucie Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk. Wybór tej tematyki badawczej oraz sformułowanie ambitnych celów naukowych zasługuje na wysoką ocenę, co uzasadnię poniżej.

Zawartości rozprawy

Rozprawa składa się sześciu rozdziałów poprzedzonych streszczeniem, spisem treści oraz listą wybranych oznaczeń, które są stosowane przez Doktoranta. Na końcu rozprawy znajduje się bogata bibliografia oraz spis tablic oraz spis licznych rysunków, które ją istotnie wzbogacają i pozwalają lepiej zrozumieć prezentowane wyniki. Dysertację zamyka spis publikacji Doktoranta oraz informacja o jego bogatej działalności konferencyjnej.

Rozdział pierwszy jest wprowadzeniem, które zawiera istotne dla całej rozprawy informacje. W dalszych częściach dysertacji znajdują się wyniki badań numerycznych i teoretycznych dotyczące przewodnictwa cieplnego w układach modelowych: ciekłego i stałego argonu (argonem autor nazywa układ modelowych atomów oddziałujących z potencjałem Lennarda-Jonesa), nanokanałów wypełnionych ciekłym argonem, nanodrutów z argonu oraz kryształów koloidalnych oddziałujących z potencjałem Yukawy o różnym stopniu polidispersji rozmiarów.

W rozdziale drugim dotyczącym podstaw teoretycznych przedstawiono definicję współczynnika przewodnictwa cieplnego, omówiono podstawy dynamiki molekularnej ze szczególnym uwzględnieniem metod stosowanych do wyznaczenia współczynnika λ oraz zdefiniowano wykorzystywane modele

i potencjały. Współczynnik przewodnictwa cieplnego został wyznaczony dwiema metodami, klasyczną metodą Green-Kubo w symulacjach równowagowych oraz metodą Müllera-Plathe w symulacjach nierównowagowych. Na uwagę zasługuje zgodność wyników otrzymanych tymi dwiema niezależnymi technikami. Recenzenta bardzo ujęło piękno i skuteczność metody Müllera-Plathe, w której ustala się strumień ciepła a następnie mierzy wytworzony gradient temperatury. Doktorant zaproponował również modyfikację metody Müllera-Plathe, która umożliwi wyznaczenie współczynnika przewodnictwa cieplnego w nanodrutach. Na końcu tej części rozprawy przedstawiono w sposób wyczerpujący szczegóły symulacji komputerowych.

W rozdziale trzecim przedstawiono wyniki dla ciekłego argonu w nanokanałach. Zbadano wpływ kształtu i poprzecznego rozmiaru nanokanału na współczynnik przewodnictwa cieplnego ciekłego argonu wzdłuż kanału. Wyniki obliczeń pokazują, że współczynnik przewodnictwa cieplnego słabo zależy od kształtu kanału i zmienia się z jego polem powierzchni poprzecznej. Zaobserwowano wzrost współczynnika przewodnictwa cieplnego argonu wraz ze wzrostem rozmiarów poprzecznych nanokanału. Uzyskana dobra zgodność obliczonych wartości współczynnika przewodnictwa cieplnego ciekłego argonu z danymi eksperymentalnymi, pozwoliła wyznaczyć charakterystyczny rozmiar poprzeczny nanokanału, poniżej którego przewodnictwo cieplne różni się od tego obserwowanego w układach makroskopowych. Wyznaczono również zależność charakterystycznego rozmiaru kanału od gęstości cieczy w nanokanałach. Ponadto w tym rozdziale pokazano, że współczynniki przewodnictwa cieplnego układów ograniczonych otrzymane metodą Green-Kubo są zgodne z wynikami uzyskanymi metodą Müllera-Plathe.

W czwartym rozdziale rozprawy przedstawiono wyniki badań stałego argonu. Otrzymane rezultaty dla stałego argonu w układzie makroskopowym są zgodne z wynikami dostępnymi w literaturze i pokazują, że λ maleje wraz ze wzrostem temperatury. W przypadku nanodrutów zbadano wpływ poprzecznego rozmiaru układu oraz temperatury na przewodnictwo cieplne. Otrzymane wyniki wskazują, że wartość współczynnika przewodnictwa cieplnego nanodrutu maleje wraz ze zmniejszeniem rozmiarów poprzecznych układu. Wyznaczono zależność charakterystycznego pola powierzchni nanodrutu, powyżej którego przewodnictwo cieplne jest takie samo, jak w układzie makroskopowym. Ponadto, omówiono modele teoretyczne przewodnictwa cieplnego w układach makroskopowych i nanodrutach. Zaproponowano model, w którym uśrednioną prędkość fononów akustycznych przybliżono średnią prędkością dźwięku w kryształach argonu i w którym uwzględniono czas relaksacji rozpraszania fononów na ściankach w całkowitym czasie relaksacji fononów. Porównano λ wyznaczone na podstawie przedstawionych modeli z wynikami symulacji komputerowych i eksperymentów. Pozwoliło to na wyciągnięcie wniosków na temat charakteru rozpraszania fononów w nanodrutach z argonu. Wyciągnięto ważny wniosek, iż obniżenie współczynnika przewodnictwa cieplnego wraz z rozmiarami poprzecznymi nanodrutu jest spowodowane dominacją

procesów rozpraszania fononów na granicach układu nad procesami rozpraszania fononów Umklapp. Dodatkowo, przeprowadzone obliczenia i symulacje komputerowe wskazują, że procesy lustrzanego rozpraszania fononów na ściankach układu przeważają nad procesami rozpraszaniem typu dyfuzyjnego.

W rozdziale piątym przedstawiono opisane zostały modelowych kryształów koloidalnych, które polegały na określeniu wpływu parametrów potencjału Yukawy i zróżnicowania wielkości cząstek w układzie na przewodnictwo cieplne kryształu. Symulacje układów Yukawy pokazały, że wzrost charakterystycznej długości ekranowania Debye'a powoduje obniżenie współczynnika przewodnictwa cieplnego oraz, że wartość λ rośnie wraz ze wzrostem temperatury. Badania modelowych kryształów koloidalnych pokazały również, że polidispersja rozmiarów cząstek ma silny wpływ na współczynnik przewodnictwa cieplnego, który maleje wraz ze wzrostem polidispersji.

W rozdziale szóstym Doktorant omawia w sposób syntetyczny główne tezy swej rozprawy.

Główne wyniki

W podsumowaniu warto podkreślić wysoką rangę wyników otrzymanych przez Pana Krzysztofa Hyżorka. W szczególności chciałbym zwrócić uwagę na udane porównanie wyników symulacyjnych i teoretycznych z rezultatami doświadczalnymi dostępnymi w literaturze. Świadczy to o istotności stosowanych oraz tworzonych modeli do opisu zjawiska przewodnictwa cieplnego. Za szczególne osiągnięcia uważam poniższe rezultaty.

1. Wyznaczenie parametru opisującego prawdopodobieństwo lustrzanego rozpraszania fononów na granicy nanodrutu. Z wartości tego parametru Doktorant wywnioskował, że procesy lustrzanego rozpraszania fononów na ściankach układu dominują nad procesami rozpraszania dyfuzyjnego. Jest to bardzo ważny wynik, który pogłębia współczesne zrozumienie przewodnictwa cieplnego w nanodrutach argonowych.
2. Wyznaczenie współczynnika przewodnictwa cieplnego ciekłego argonu w nanokanałach i w nanodrutach.
3. Określenie rozmiaru poprzecznego nanokanału i nanodrutu, powyżej którego współczynnik przewodnictwa cieplnego argonu nie różni się od odpowiedniej wartości λ w układzie makroskopowym.
4. Pokazanie, że współczynnik przewodnictwa cieplnego ciekłego argonu w nanokanałach i nanodrutach słabo zależy od kształtu i zmienia się z polem powierzchni poprzecznej.
5. Wykazanie, że przewodnictwo cieplne stałego argonu oraz argonowych nanodrutów obliczone w symulacjach komputerowych można również otrzymać z modeli teoretycznych.

6. Pokazanie, że współczynnik przewodnictwa cieplnego kryształu Yukawy maleje wraz ze wzrostem polidispersji rozmiarów cząstek.

Drobne uwagi

W tekście znajdują się drobne błędy gramatyczne, których nie jednak nie wskażę, gdyż nie mają one istotnego wpływu na przejrzystość i klarowność rozprawy.

Konkluzja

Stwierdzam, bez żadnych wątpliwości i z prawdziwą przyjemnością, że przedstawiona mi do oceny rozprawa doktorska mgr. inż. Krzysztofa Hyżorka spełnia konieczne wymagania stawiane przy ubieganiu się o stopień doktora nauk fizycznych i wnoszę o dopuszczenie mgr. inż. Hyżorka do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Jednocześnie z uwagi na wysoki poziom naukowy rozprawy doktorskiej oraz rangę naukową uzyskanych wyników wnoszę o jej wyróżnienie.

Michał Banaś