Poznań, 18.10.2018 r.

prof. Adam Lipowski
Wydział Fizyki
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Ryszarda Wiśniowskiego „Efektywne przewodnictwo elektryczne wzorców mikrostrukturalnych mieszaniny dwuskładnikowej w modelu sieciowym z uwzględnieniem oddziaływań pomiędzy najbliższymi sąsiadami"

Rozprawa doktorska mgr. Ryszarda Wiśniowskiego została zrealizowana w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Opolskiego pod opieką prof. UO, dr. hab. Wiesława Olchawy. Przedmiotem rozprawy mgr. Wiśniowskiego jest zagadnienie wyznaczania przewodnictwa elektrycznego w układach niejednorodnych oraz podlegających termicznym fluktuacjom. Jest to tematyka ciekawa i dość aktualna, biorąc pod uwagę chociażby technologicznie inspirowane zainteresowanie układami wieloskładnikowymi czy mikroemulsjami.

We wstępie mgr Wiśniowski dokonuje krótkiego wprowadzenia do tematyki rozprawy oraz kreśli jej plan. W rozdziale 2 doktorant omawia metody obliczania przewodnictwa efektywnego w ośrodkach niejednorodnych. W szczególności analizuje on techniki bazujące na pojęciu ośrodka efektywnego. Omawia on również techniki dyskretyzacji ośrodka poprzez zastąpienie go układem oporników oraz metody numeryczne wykorzystujące ścisłe rozwiązanie równania Laplace'a.

Rozdziały 3 i 4, w których omówiono dwuskładnikowe modele mieszaniny o różnej przewodności, to wprowadzenie do zasadniczej części rozprawy. Przedstawiono w nich model sieciowy podlegający fluktuacjom termicznym, będący w istocie modelem Isinga w interpretacji gazu sieciowego. W poglądowy sposób można przeanalizować własności tego modelu w przybliżeniu pola średniego, co mgr Wiśniowski uczynił w rozdziale 4. Nie do końca jest jednak dla mnie jasne, co reprezentują operatory wprowadzonego modelu Isinga. Czy są to pojedyncze atomy czy raczej grupy atomów (ziarna, mikrokrople)? W tym drugim przypadku mam wrażenie, że energia termiczna (kT) może być niewystarczająca, aby aktywować przemieszczanie takich obiektów. W takim przypadku wprowadzoną w modelu temperaturę należałoby interpretować raczej w pewien sposób efektywny.

Najważniejsze wyniki rozprawy zawarte są w rozdziałach 5 (model dwuwymiarowy) i 6 (model trójwymiarowy). W rozdziałach tych własności termodynamiczne modelu badane są przy pomocy symulacji Monte Carlo, natomiast przewodnictwo elektryczne otrzymano w oparciu o dyskretyzację ośrodka i ścisłe rozwiązanie równania Laplace'a. Są to metody znacznie bardziej wyrafinowane niż metody bazujące na przybliżeniu pola średniego, a jednocześnie dostarczające dokładniejszych wyników. W symulacjach Monte Carlo autor rozprawy stosuje tzw. algorytm czasu ciągłego. W niektórych reżimach, zwłaszcza w niskich temperaturach, algorytm ten jest bardzo efektywny. Wyniki autora obejmują jednak szeroki

zakres temperatur i w wyższych temperaturach algorytm z losowym wyborem par może okazać się wydajniejszy. Zastanawiam się, czy Autor rozprawy porównywał wydajność tych algorytmów i czy nie rozważał wersji hybrydowej - w niskich temperaturach algorytm z czasem ciągłym a w wyższych algorytm z losowym wyborem.

Opisując metodę Monte Carlo (podrozdział 5.0.1), mgr Wiśniowski zastanawia się, czy wersje z lokalnym i nielokalnym wyborem par cząstek są równoważne. Ponieważ tylko lokalny wybór prowadzi do formowania się obserwowanych eksperymentalnie struktur labiryntowych, autor decyduje się na ten wariant algorytmu jako bardziej adekwatny. Zabrakło mi jednak w rozprawie stwierdzenia, że pod względem własności równowagowych oba algorytmy dają takie same wyniki, również poniżej punktu krytycznego. Co więcej, struktury labiryntowe to stany dalekie od równowagi i ich dalsza (być może dużo dłuższa) ewolucja prowadzić będzie do struktur o niższej energii (takich jak np. na rys 5.1.a). Moje uwagi nie podważają jednak tego, że w kontekście obserwowania struktur niejednorodnych dynamika Kawasakiego może być faktycznie bardziej adekwatna.

Najważniejszy wynik w rozdziałach 5 i 6 to w mojej opinii obliczenie przewodnictwa w układach przewodnik izolator (rys. 5.22 i 6.15). W przypadku próbek otrzymanych w nieskończonej temperaturze przewodnictwo to maleje do zera dla koncentracji pokrywającej się z progiem perkolacyjnym. Ponadto wykładnik krytyczny t opisujący wzrost przewodnictwa w okolicy tego progu dość dobrze zgadza się oszacowaniami znanymi z literatury. Wyniki te potwierdzają poprawność tej dość złożonej procedury numerycznej. Mgr Wiśniowski zaznacza, że wartość tego wykładnika jest uniwersalna i nie zależy od temperatury przygotowywania próbki ani od rodzaju oddziaływań. Moja wątpliwość w tym względzie dotyczy próbek przygotowywanych w temperaturze krytycznej. W tym przypadku układ wykazuje silną niejednorodność i daleko-zasięgowe korelacje, co być może modyfikować będzie wartość wykładnika krytycznego t. Najprawdopodobniej jednak ewentualna weryfikacja wymagałoby dość czasochłonnych symulacji.

W swojej rozprawie mgr Wiśniowski analizował wpływ struktury układów niejednorodnych na przewodnictwo elektryczne. Zastanawiam się, czy nie warto by rozszerzyć tej analizy i zapytać o wpływ pola elektrycznego na strukturę. Zwłaszcza w mikroemulsjach pole elektryczne może indukować pewne zmiany strukturalne (np. A. I. Abubakar & J. O. Bello (1991) Enhanced Coalescence of Emulsion in an Electric Field, Separation Science and Technology), co powinno z kolei wpływać na efektywne przewodnictwo. Lista możliwych rozszerzeń jest oczywiście dłuższa I obejmuje na przykład układy trójskładnikowe, gdzie każdy składnik charakteryzował się będzie specyficzną przewodnością elektryczną a dynamika strukturalna byłaby analogiczna do dynamiki modelu Pottsa. Można również pomyśleć o modyfikacji hamiltonianu Isinga poprzez dodanie dodatkowych oddziaływań. Niektóre z takich rozszerzeń prowadzić mogą do dynamiki szklistej i struktury labiryntowe byłyby wówczas bardziej stabilne.

Rozprawa mgr. Wiśniowskiego napisana jest bardzo starannie. Liczne ilustracje w poglądowy sposób przedstawiają użyte metody, własności badanych układów czy uzyskane wyniki. Pracę tę z powodzeniem można polecić jako lekturę np. dla studentów zainteresowanych zgłębianiem tematyki przewodnictwa elektrycznego w układach niejednorodnych. Również dynamika i statyka modelu Isinga (rozdział 4.1) są jasno i szczegółowo opisane, a pewne zagadnienia, jak np. metastabilność oraz dekompozycja spinodalna i bimodalna, w literaturze poświęconej tej tematyce traktowane są często bardzo powierzchownie. Rozprawa ta bazuje na wynikach opublikowanych w renomowanych czasopismach fizycznych, ale zawiera również wyniki, które nie zostały jeszcze opublikowane. W sumie dorobek naukowy mgr. Wiśniowskiego, jak można się zorientować ze spisu literatury, obejmuje 6 pozycji, co na tym etapie kariery naukowej można jak najbardziej uznać za zadawalający. Jego publikacje dotyczą modeli analizowanych w rozprawie, ale również badań nad konstrukcją entropowych deskryptorów wykorzystywanych do charakteryzacji układów niejednorodnych.

W podsumowaniu stwierdzam, że przedstawiona mi do recenzji rozprawa doktorska zawiera oryginalne wyniki autora, wnoszące istotne, nowe treści do badań nad przewodnictwem układów niejednorodnych, a zatem spełnia ustawowe i zwyczajowe wymagania. Wnoszę o dopuszczenie mgr. Ryszarda Wiśniowskiego do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Prof. Adam Lipowski

A. Lipowski

Wydział Fizyki,

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu