

Stanisław Krukowski
Instytut Wysokich Ciśnień PAN
01-142 Warszawa
ul Sokołowska 29/37

Rada
Wydziału Podstawowych Problemów Techniki
Politechnika Wrocławska
50-370 Wrocław
Wybrzeże Wyspiańskiego 27

**Recenzja rozprawy habilitacyjnej dr Wiesława Polaka
pt. *Symulacje powstawania i analiza struktury wewnętrznej klastrów Lennard-Jonesa***

Rozprawa habilitacyjna dr Wiesława Polaka pt *Symulacje powstawania i analiza struktury wewnętrznej klastrów Lennard-Jonesa* składa się z 10 publikacji naukowych opublikowanych w szeregu czasopism, w tym 2 w Physical Review B, 2 w European Physical Journal D, 1 w Physical Review E, 1 w Europhysics Letters, 1 w Journal of Crystal Growth, 1 w Computational and Theoretical Chemistry, 1 w Crystal Research and Technology oraz 1 w Chemical Physics Letters. Czasopisma te są w większości wiodące w dziedzinie fizyki ciała stałego, więc formalny aspekt jakości prezentowanych publikacji należy ocenić bardzo dobrze. Należy podkreślić że za wyjątkiem pierwszej publikacji są to publikacje samodzielne, co zdarza się rzadko i oznacza że jest to samodzielny wkład dr Polaka. Publikacje te były cytowane 80 razy, co jest wynikiem dobrym, zwłaszcza że są to publikacje teoretyczne gdzie liczba cytowani jest z reguły znacznie niższa. W sumie prezentują one wystarczający dorobek uzasadniający podjęcie procedury nadania stopnia doktora habilitowanego.

Wiesław Polak otrzymał stopień doktora w 1997 r za prace doktorską pod pokrewnym tytułem *Modelowanie powstawania klastrów halogenków metali alkalicznych*. Otrzymany cykl prac habilitacyjnych potwierdza ciągłość zajmowania się tematyka klastrów, z tym że są to zupełnie inne układy molekularne z drastycznie innymi oddziaływaniami międzyatomowymi, tak więc temat różni się znacząco od rozprawy doktorskiej.

Niezależnie od zajmowania się tym tematem dr Polak uzyskał i opublikował inne wyniki naukowe. Dr Polak był współautorem 3 innych publikacji po uzyskaniu stopnia doktora oraz 4 publikacji przed uzyskaniem stopnia doktora. Publikacje te były cytowane 42 razy, W sumie dr Polak jest autorem i współautorem 17 publikacji które były cytowane 122 razy. Ponadto dr Polak jest współautorem 4 monografii. Dr Polak miał 8 prezentacji ustnych na międzynarodowych konferencjach naukowych oraz brał udział w 19 konferencjach naukowych. Daje to niezły choć nie wyróżniający dorobek naukowy, choć otrzymany w okresie 29 lat.

W pracy H1 dr Polak zajmował się zagadnieniami metodologicznymi związanymi z identyfikacją porządku w układach o dowolnym porządku. Dr Polak omawia stosowane metody identyfikacji porządku, w tym rozkłady kosinusa katów tworzonych przez trójki atomów, metoda niezmienników oparta na harmonikach sferycznych, metoda konstrukcji wielościanów Woronoja oraz nowa metoda wielościanów zaproponowana przez autora, będąca pochodną od poprzedniej metody. Autor omawia wady i zalety każdej z tych metod i przekonuje że nowa autorska metoda ma przewagę nad pozostałymi metodami. W ramach autorskiej metody autor identyfikuje podstawowe wielościany. W dalszej części pracy autor

używa nowej zaproponowanej metody do analizy układów składających się z kilkuset atomów oddziałujących za pomocą potencjału Lennarda-Jonesa w ramach ewolucji za pomocą standardowej metody Monte Carlo z użyciem algorytmu Metropolis. Otrzymane w tej pracy wyniki stanowią znaczące osiągnięcie autorów.

Kolejna praca H2 poświęcona jest analizie wzrostu klastrów atomów oddziałujących za pomocą potencjału Lennarda-Jonesa z parametryzacją podaną przez Kittela. Ewolucja układu odbywa się za pomocą algorytmu Metropolis, przy czym temperatura zarodka nowej fazy jest niższa niż temperatura otaczającej fazy macierzystej. Obszar fazy macierzystej jest skończony, przy czym algorytm wymusza utrzymywanie stałego przesylenia względem zarodka. Wyjściowy zarodek posiada strukturę regularną płasko-centrowaną, a więc strukturę stabilną energetycznie. Otrzymane wyniki wskazują że układ wykazuje niestabilność kształtu typową dla wzrostu fraktalnego dla szybkiego wzrostu. W samej rzeczy podobne wyniki były opublikowane przez nas 8 lat wcześniej. Inne wyniki wskazują że dla wolniejszego wzrostu otrzymuje się silnie zdefektowane struktury o symetrii typowej dla heksagonalnej sieci gęstego upakowania.

Kolejna trzecia praca z tego cyklu H3, jest poświęcona zagadnieniom krystalizacji klastrów cieczy L-J podczas ochładzania. Do symulacji użyto algorytmu Metropolis, przy czym temperatura była obniżana w sposób skokowy liniowo z liczbą kroków Monte Carlo (MC) od zadanej temperatury początkowej, która system osiąga po przejściu okresu wstępnego. W zasadzie jest to odpowiednik termalizacji układu. Temperaturę przejścia w klastrze identyfikowano za pomocą detekcji pików w wykresie fluktuacji energii potencjalnej układu. W pobliżu punktu przejścia obserwowano niestabilność strukturalną klastrów. Otrzymana temperatura silnie rosła z rozmiarem używanego klastra zachowując zależność $N^{1/3}$, a więc nietypową dla procesów nukleacji.

W pracy H4 autor bada krystalizację klastrów L-J z fazy gazowej za pomocą tej samej metody modelowania. Jako struktur wyjściowych używa klastrów Van de Waala, czyli klastrów struktury regularnej płasko centrowanej czyli gęstego upakowania z wbudowanymi parami błędów ułożenia odpowiadających strukturze heksagonalnej. W symulacjach używa dwu temperatur (zredukowane temperatury: $T^* = 0.50$ oraz $T^* = 0.30$). Podczas etapu wstępnego, bez wzrostu, w wyższej temperaturze klastry zmieniają kształt na zaokrąglony, podczas gdy w niższej zachowują swój początkowy kształt. Oznacza to że w wyższej temperaturze zachodzi zmiana struktury, natomiast w niższej struktura wewnętrzna jest w zasadzie zamrożona. Powoduje to inny wynik symulacji wzrostu: w obydwu temperaturach na powierzchni tworzą się struktury heksagonalne, lecz w wyższej temperaturze zanikają, natomiast w niższej zostają zamrożone. Praca zawiera też zupełnie dziwaczne stwierdzenia, np. w samym abstrakcie autor stwierdza że efekty entropowe preferują fazę regularną nad heksagonalną. Jest to stwierdzenie zupełnie nieprawdziwe gdyż entropia doskonałej fazy regularnej i heksagonalnej jest sobie równa i na dodatek równa zero. Natomiast faktem jest że wyższa temperatura sprzyja ruchliwości atomów i usuwaniu błędów ułożenia, ale nie to wiele wspólnego w w/w stwierdzeniem z abstraktu. W zasadzie entropia nie jest w żaden sposób zdefiniowana wewnątrz pracy, co więcej termodynamicznie jest wyższa w naturalny sposób w temperaturze wyższej, natomiast nieporządek krystalograficzny, czyli ekwiwalent entropii jest wyższy w klastrach otrzymywanych w temperaturze niższej.

W pracy H5 autor bada tworzenie nieporządku w modelu identycznym do pracy H4. Różnica polega na tym że stan wyjściowy to jest faza regularna płasko centrowana. Użyto tych samych temperatur co w pracy H4. W temperaturze niskiej, po termalizacji uzyskano kształt ośmiościanu, natomiast w temperaturze wysokiej kształt bliski kuli. Wzrost w niskiej temperaturze prowadzi do powstania kształtu „przestrzennego krzyża” zdominowanego przez szybki wzrost na szorstkich ścianach $\{100\}$ i wolny na gładkich ścianach $\{111\}$. W przypadku wysokiej temperatury kształt kryształu jest bliski kuli. Oczywiście jest to wolny

wzrost. W przypadku niskiej temperatury powstaje duża liczba błędów ułożenia, czyli struktur heksagonalnych, w przypadku wysokiej błędy te są bardzo rzadkie. W zasadzie nie występują inne ułożenia. W sumie rezultaty pracy potwierdzają standardowe założenia teorii wzrostu kryształów. Innowacyjnym wyjątkiem są uwagi na temat entropii, scharakteryzowane powyżej, do których autor jest silnie przywiązany.

Praca H6 poświęcona jest zależności od rozmiaru struktury klastrów, otrzymywanych przez schładzania do bardzo niskiej temperatury $T^* = 0.05$. Autor twierdzi że podczas przechodzenia przez punkt krzepnięcia schładzanie jest spowolnione co gwarantuje że nie tworzą się konfiguracje metastabilne. Autor bada 14 rozmiarów klastrów, od 55 do 923 atomów. Interesujące zagadnienie przejścia od symetrii punktowej tzn. skończonego układu do nieskończonego obszaru fazy stałej zostało określone na 280 atomów co dobrze zgadza się z eksperymentalnymi wynikami identyfikującym przejście na 300 i 450 atomów.

W pracy H7 autor zajmuje się strukturą klastrów L-J posiadających magiczne liczby atomów: 55, 147, 309, 561 i 923. Model jest identyczny do używanego w pracy H6. W pracy zidentyfikowano klastry należące do fazy stałej, resztę traktując jako fazę ciekłą. Otrzymane wyniki wskazują na istnienie warstwowej struktury klastrów magicznych o różnej gęstości.

W pracy H8 autor rozpatruje ewolucję zespołu klastrów o magicznej liczbie 923. Model użyty w symulacjach jest identyczny do pracy H7. Autor identyfikuje zarodki fazy stałej i stwierdza że są to klastry nieregularne. Po osiągnięciu rozmiaru 340 atomów zachodzi tworzenie uporządkowanej warstwowej struktury dużego klastra. Zarodek osiąga kształt zwarty po dołączeniu 400 atomów. Dzieje się to na skutek szybkiej migracji atomów fazy ciekłej po powierzchni zarodka fazy stałej.

W pracy H9 użyto opracowanego powyżej modelu dla symulacji i analizy własności klastrów rosnących z fazy gazowej. Modelowanie objęło szereg temperatur $T^* = 0.25, 0.30, 0.35$ i 0.40 . Jako fazę wyjściową użyto 13 atomowego klastra L-J ikosaedrycznego. Otrzymane klastry osiągały znaczne wielkości do 9800 atomów. Wzrost był prowadzony bardzo wolno co sprzyjało otrzymywaniu zwartych klastrów. Stosowane temperatury odpowiadały topnieniu klastra 13 atomowego, więc podczas wzrostu zachodziła krystalizacja z fazy ciekłej w rozmach pomiędzy 160 a 1000 atomów. Klastry o rozmiarach poniżej 1000 wykazują regularną strukturę poly-ikosaedryczną przy czym klastry w wyższej temperaturze mają często strukturę silnie zdefektowanej fazy stałej. Wzrost klastrów o rozmiarach powyżej 1000 prowadzi do przyłączania warstw regularnych lub heksagonalnych.

Praca H10 jest krótkim listem zawierającym podsumowanie modelowania dla dużych rozmiarów klastrów. Jako zarodka wyjściowego używano idealnych klastrów ikosaedrycznych z Cambridge Cluster Database, otrzymanych przez Xiang et al. Podczas symulacji użyto stosunkowo niskiej temperatury $T^* = 0.35$. Otrzymano zdefektowane struktury uporządkowanych klastrów polyikosaedrycznych.

W podsumowaniu przeglądu prac stwierdzam że autor dokonał znacznego postępu na drodze do zrozumienia wzrostu klastrów L-J o niewielkich rozmiarach. Wprowadził z pomocą współautora, nową metodę kategoryzacji struktur atomowych i z sukcesem zastosował ją do analizy otrzymywanych struktur klastrów. Wyznaczył warunki do wzrostu małych klastrów i powiązał je z temperaturą wzrostu, zarówno dla fazy ciekłej jak i dla fazy gazowej. Ponadto określił strukturę wzrostu klastrów o rozmiarach większych do 10000 atomów. Razem tworzy to znaczący dorobek naukowy.

Otrzymane wyniki były prezentowane na międzynarodowych konferencjach naukowych. Dr Polak wygłosił 8 prezentacji ustnych oraz zaprezentował 19 plakatów. Dr Polak jest również recenzentem w szeregu międzynarodowych czasopism naukowych.

Dr Polak posiada również znaczący dorobek w działalności organizacyjnej. Dr Polak pracował jako sekretarz techniczny Polskiego Towarzystwa Wzrostu Kryształów w latach 1998 – 2001, czyli w okresie bardzo ważnym, gdy formułowana była warunki prezentacji

PTWK w Sieci WWW, wnosząc cenny wkład w jego realizację. Ponadto dr Polak był przewodniczącym Komisji Rewizyjnej Oddziału Lublin Polskiego Towarzystwa Fizycznego w latach 2014-2015 oraz 2016-2017. Był ponadto członkiem komitetu organizacyjnego konferencji Fifth International Conference on Intermolecular Interactions in Matter (IIMP-5 1999 Lublin).

Z racji swojego miejsca pracy dr Polak w naturalny sposób osiągnął znaczący dorobek dydaktyczny, obejmujący zajęcia ze studentami, oraz opieki nad pracami dyplomowymi. Zostało to docenione przez JM Rektora Politechniki Lubelskiej przez przyznanie dr Polakowi trzech nagród rektorskich.

Podsumowując ocenę dorobku naukowego, organizacyjnego i dydaktycznego stwierdzam że dr Polak spełnia wymogi związane z uzyskaniem stopnia doktora habilitowanego. W związku z tym zgodnie z Art. 26 Ustawy z dnia 14 marca 2003 roku o stopniach naukowych i tytule naukowym (Dziennik Ustaw Nr 65 poz. 595 wraz ze zmianami w Dziennik Ustaw z 2005 roku Nr 164, poz. 1365, Dziennik Ustaw z 2016 poz. 882 i 1311 oraz Dziennik Ustaw z 2017r poz. 859) wnioskuję do Rady Wydziału Podstawowych Problemów Techniki Politechniki Wrocławskiej o dopuszczenie dr Wiesława Polaka do dalszego postępowania kwalifikacyjnego w celu nadania stopnia doktora habilitowanego nauk fizycznych.



Prof. dr hab. Stanisław Krukowski

Warszawa 12.05.2018