



INSTYTUT FIZYKI POLSKIEJ AKADEMII NAUK

INSTITUTE OF PHYSICS, POLISH ACADEMY OF SCIENCES

02-668 WARSZAWA, AL. LOTNIKÓW 32/46
fax: (48-22) 116-0926; <http://info.ifpan.edu.pl>

4 kwietnia 2018 r.

Ocena Osiągnięcia naukowego dr nauk fizycznych Wiesława Z. Polaka zatytułowanego: "Symulacje powstawania i analiza struktury wewnętrznej klastrów Lennard-Jonesa"

Na Osiągnięcie przedstawione do oceny składa się 10 prac w pismach o czynnikach wpływu od 0,768 (Crystal Research and Technology) do 2,962 (Physical Review B) i opublikowanych w latach 2003 - 2016. Tych 10 prac jest w sumie cytowanych 75 razy, co stanowi około 61% wszystkich jego cytowań (czyli ze 123, w tym 83 bez autocytowań). Wszystkie zostały wykonane po doktoracie. Suma czynników wpływu tych 10 prac wynosi 20, czyli około 2 na artykuł. Najlepiej cytowany artykuł (25 cytowań) został napisany z Andrzejem Patrykiewiczem w 2003 r. Dr Polak określa swój wkład w tym artykule na 85 %. Pozostałe artykuły są jedno-autorskie.

Autor publikuje od 1993 r., ale publikuje mało. Jest 11 lat (1994, 1998, 2000, 2001, 2002, 2010, 2011, 2012, 2014, 2015, 2017), w których nie powstał ani jeden artykuł. Czynniki Hirscha dla dr. Polaka wynosi 7. Doktorat obronił na UMCS w Lublinie w 1997 r. Jego promotorem był prof. Keshre Sengwel. Tytuł doktoratu to: "Modelowanie powstawania klastrów halogenków metali alkalicznych".

Wszystkie prace wchodzące w skład Osiągnięcia są tematyczną kontynuacją doktoratu i dotyczą właściwości klastrów Lennarda-Jonesa, rozważanych w kontekście inicjowania procesu krystalizacji i analizowanych metodą symulacji Monte Carlo. Dziwi mnie, że autor nie prowadzi tych badań metodą dynamiki molekularnej. Układy atomów Lennarda-Jonesa w obliczeniach dynamicznych są przecież obecnie powszechnym standardem i pozwalają badać dynamikę procesów a nie tylko właściwości równowagowe układów.

Schemat numeryczny wielu tych prac polega na analizowaniu fizyki procesów zainicjowanych poprzez dodawanie kolejnych atomów Lennarda-Jonesa do układu. Potencjał Lennarda-Jonesa najlepiej nadaje się do układów zbudowanych z atomów gazów szlachetnych, ale używany jest też w sposób generyczny do wielu innych układów jako najprostszy model studni potencjału.

Jednak samo zastosowanie metody stochastycznej a nie rozwiązywanie równań ruchu każe mi uznawać stwierdzenia o rozwoju układu w czasie z pewnym niedowierzaniem i przymrużeniem oka.

Badania, teoretyczne i doświadczalne, nad klastrami Lennarda-Jonesa datują się od 1971 r. W szczególności wykazano istnienie zjawiska współistnienia fazy ciekłej z fazą gazową i fazy ciekłej z fazą krystaliczną. Wyznaczano też globalne minima energetyczne coraz większych klastrow. Inne podejście numeryczne polegało na startowaniu z określonych struktur krystalicznych i relaksowaniu ich do nowych struktur. W wypadku dużych klastrow (więcej niż 10 000 atomów) wykazano istnienia współistnienia lokalnie ustrukturyzowanych domen (struktury fcc i hcp) o różnych kierunkach ułożenia atomów.

Dr Polak symulował układy do 55 do 10 000 atomów i analizował ich struktury globalne, lokalne, oraz naturę pojawiających się defektów podczas ewolucji układu dla różnych stanów początkowych. W pracy H1, opublikowanej w Phys. Rev. B w 2003 r., badał małe klastry, 200-atomowe, i w analizie wprowadził 4 parametry lokalnego porządku związane z sieciami fcp, hcp, bcc i pdp (pentagonal direct-packed). Symulacje dotyczyły zakresu od 0.05 do 0.49 zredukowanych temperatur. Przypadkowe początkowe umieszczenie atomów podczas symulacji przeprowadzonych w połowie tego zakresu dają zagregowane nieregularne struktury, w których dominują uporządkowania hcp i pdp i w których brakuje lokalnego uporządkowania typu bcc. Rozważono 201 różnych trajektorii. Rodzaj krystalicznego zarodka oraz kształt agregatu zależał od początkowego rozmieszczenia atomów.

Praca H2 dotyczy procesu wzrostu agregatu. Autor startuje z klastrow 200-atomowych o strukturze fcc i kształcie obciętego ośmiościanu, które umieszcza w gazowym otoczeniu, umożliwiającym wzrost do około 2000 atomów. Podczas procesu wzrostu struktury się zmieniają – pojawia się mieszanina różnych uporządkowań, głównie fcc, hcp i dh (decahedral). Zmiany strukturalne następują między innymi w wyniku częściowego zniszczenia zarodka o strukturze fcc oraz kinetycznego pułapkowania wytwarzanego przez gęsto upakowane warstwy fcc i hcp, co prowadzi do problemów z ustawianiem się kolejnych warstw.

Praca H3 poszukuje przejścia ciec-ciało stałe dla układów od 55 do 923 cząstek, które są schładzane. W szczególności badane jest położenie maksimum ciepła właściwego. Ponadto, na podstawie analizy strukturalnej, autor wykazał, że dla większych układów różnica pomiędzy temperaturami zamarzania układu o N cząstkach i układu nieskończenie dużego maleje jak $N^{-1/3}$.

Praca H4 dotyczy wzrostu klastrow fcc z wbudowanymi defektami. Jest bardzo podobna do pracy H3. Praca H5 jest również podobna, ale obiekt początkowy nie ma defektów a kontrolowana jest gęstość atomów w otaczającej fazie gazowej. Autor określa udział lokalnych struktur fcc i hcp w agregacie w funkcji rozmiaru agregatu: udział fcc rośnie z rozmiarem szybciej niż hcp. Praca H6 jest również podobna do poprzednich, ale teraz autor się skupia na zależności energii potencjalnej od rozmiaru agregatu i identyfikuje lokalne i globalne minima

energetyczne.

Praca H7 jest nieco inna. Autor bada układy Lennarda-Jonesa w fazie ciekłej i przechłodzonej fazie ciekłej. Głównym celem pracy jest wyznaczenie radialnej funkcji gęstości i wyjaśnienie tworzenia się koncentrycznych warstw wokół cieczowych klastrów atomów.

Praca H8 poświęcona jest tworzeniu się agregatów o nieregularnych kształtach podczas szybkiego schładzania. Prace H9 i H10 są podobne do prac H1-H6, z tym, że teraz krystaliczny zarodek startowy ma kształt dwudziestościanu. Autor identyfikuje obszary uporządkowane i nieuporządkowane w rosnących agregatach.

Prace H1-H10 są skonstruowane na jedno kopyto. Są to warianty i podwarianty pracy H1. Niby wiążą się ze wzrostem kryształów, ale ich związek z doświadczeniami diskutowany jest w sposób bardzo nikły.

Web of Science podaje 17 artykułów autorstwa dr. Polaka (w tym trzy komunikaty konferencyjne). Jeden z nich dotyczy problemu z mechaniki kwantowej, cztery tworzenia się kryształów w układach doświadczalnych (np. molekuł KCl). 12 pozostałych to teoretyczne układy Lennarda-Jonesa, w tym 10 to artykuły habilitacyjne. Jest to dorobek bardzo wąski pod względem tematycznym. Habilitacja ma świadczyć o zdolności do prowadzenia działalności naukowej doktorantów. To wymaga dużo szerszego horyzontu badań niż ten, jaki demonstruje dr Polak.

Dr Polak uzyskał nagrody Rektora Politechniki Lubelskiej – 2 zespołowe i jedną indywidualną. Dr Polak był kierownikiem i jedynym wykonawcą jednego małego grantu NCN (15 miesięcy, 37 000 zł). Nie miał ani jednego wykładu zaproszonego. Po uzyskaniu stopnia doktora wygłosił cztery komunikaty (jeden we Francji i 3 w Polsce) oraz wywiesił 14 plakatów. Prowadził standardową działalność dydaktyczną na Politechnice Lubelskiej. Prowadził pewną działalność popularyzacyjną: artykuł w Postępie Fizyki o konferencji w Hadze oraz warsztaty dla gimnazjalistów. Jego jedyny staż, półroczny, odbył się w Lublinie, na UMCS. Jego działalność organizacyjna była nikła: przez 4 miesiące pełnił obowiązki kierownika zakładu, przez 2 lata był członkiem komisji rewizyjnej lubelskiego oddziału PTF i był sekretarzem technicznym Towarzystwa Wzrostu Kryształów.

Autoreferat dr. Polaka jest dokładnym powtórzeniem informacji zawartych w pracach H1-H10 i wnosi niewiele nowego.

Podsumowując, nie sądzę, że przedłożona rozprawa habilitacyjna dr. Polaka spełniają warunki określone w artykule 18 Ustawy z dnia 14.03.2003 o stopniach naukowych oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki. Działalność naukowa dr. Polaka jest repetytywna i na niskim poziomie. Brakuje poważnego dokonania. Jego prace H1-H10 mogłyby stanowić podstawę do napisania tylko 2-3 solidnych i pewnie pożytecznych artykułów. Pozostałe składniki oceny również są kiepskie. Nie uważam, że działalność dr. Polaka zasługuje na przyznanie mu habilitacji.



Prof. dr hab. Marek Cieplak

Instytut Fizyki PAN

Środowiskowe Laboratorium Fizyki Biologicznej

Email mc@ifpan.edu.pl , www.ifpan.edu.pl/~cieplak