

Jerzy Górecki, prof. dr hab.
Instytut Chemii Fizycznej PAN
Kasprzaka 44/52
01-224 Warszawa
jgorecki@ichf.edu.pl

Warszawa, 01 luty 2019

**Recenzja rozprawy doktorskiej magistra inżyniera
Krzysztofa Hyżorka pt.:
Wpływ ograniczeń geometrycznych i polidispersji rozmiarów cząstek
na przewodnictwo cieplne układów modelowych.**

Rozprawa doktorska magistra inżyniera Krzysztofa Hyżorka pt.: "Wpływ ograniczeń geometrycznych i polidispersji rozmiarów cząstek na przewodnictwo cieplne układów modelowych", napisana pod kierunkiem dr hab. Konstantina V. Trietiaikowa, profesora IFM PAN, poświęcona jest zastosowaniu metody dynamiki molekularnej do obliczenia współczynnika przewodnictwa cieplnego dla układów o rozmiarach mierzonych w nanometrach. Autor przeprowadził symulacje dla układów modelowych - cząstek oddziałujących potencjałem opisującym atomy argonu oraz cząstek koloidalnych, których oddziaływanie opisuje potencjał Yukawy. Problematyka pracy jest ważna, gdyż efektywna dyssypacja ciepła jest jednym z głównych problemów przy projektowaniu układów scalonych o dużej skali integracji.

Rozprawa mgr. inż. Krzysztofa Hyżorka jest napisana zwięźle, liczy tylko 110 stron i zawiera mniej niż 80 stron merytorycznego tekstu, co jest dużą zaletą dla recenzującego. Jej struktura jest typowa dla prac doktorskich: na początku przedstawiono problem i wprowadzenie teoretyczne, a kolejne rozdziały zawierają wyniki własne i ich podsumowanie. Po nich znajdujemy spis literatury (111 pozycji) oraz listę osiągnięć doktoranta: 2 publikacje związane z tematem rozprawy opublikowane wspólnie z promotorem, w których mgr inż. Hyżorek jest pierwszym autorem, 1 publikację poświęconą symulacjom mikroskopowym układów opisywanych potencjałem Yukawy oraz 8 prezentacji na konferencjach i szkołach.

Komentując wstęp do rozprawy, uważam, że rozprawa doktorska nie jest zbiorem uzyskanych wyników, ale powinna mieć postawioną tezę, którą wyniki uzyskane przez doktoranta potwierdzają (albo nie). Zaprezentowania tezy rozprawy nie znajduję we wstępie do niej. W moim odczuciu głównym celem rozprawy nie jest, jak pisze jej Autor (str. 14), "zbadanie wpływu rozmiaru i kształtu ... na przewodnictwo cieplne", a przekonanie czytelnika, że metoda dynamiki molekularnej może być zastosowana do obliczenia współczynnika przewodnictwa cieplnego układów w nanoskali i pozwala otrzymać wyniki o ogólnym charakterze.

Jeśli chodzi o wstęp literaturowy to uważam, że omówienie teorii przewodnictwa ciepłego ciał stałych (podrozdziały 4.3.1, 4.3.2 i część 4.3.3) też powinno się w nim znaleźć.

W kolejnych rozdziałach doktorant przedstawia wyniki własnych symulacji dotyczące:

- przewodnictwa ciepłego ciekłego argonu w dużej objętości oraz w nanokanałach (rozdział 3),

- przewodnictwa ciepłego drutów ze stałego argonu ze szczegółowym porównaniem rezultatów symulacji z modelem przewodnictwa opartym o własności rozpraszania fononów (rozdział 4)

oraz

- obliczenia przewodnictwa ciepłego kryształów koloidalnych ze szczególnym uwzględnieniem polidispersji molekuł (rozdział 5).

Rozprawa zawiera wiele interesujących wyników podsumowanych w rozdziale 6. Nie będę ich szczegółowo omawiać, odsyłając zainteresowanych do lektury rozprawy, natomiast wymienię kilka, które zainteresowały mnie najbardziej:

- Mgr inż. Krzysztof Hyżorek otrzymał bardzo dobrą zgodność wyników symulacji dla współczynnika przewodnictwa ciepłego ciekłego argonu w objętości z danymi doświadczalnymi. Może to dziwić, bo prawo Fouriera wiążące liniowo przepływ ciepła z gradientem temperatury zostało sformułowane dla "małych" gradientów, a w symulowanych układach gradienty temperatury są rzędu $4 \cdot 10^9$ deg/m (Rys. 2.1) lub jeszcze więcej (Rys. 3.3b). Myślę, że problem jest wart dalszych badań. W publikacji "Heat flow studies for large temperature gradients by molecular dynamics simulation" [András Baranyai, Phys. Rev. E 54, 6911 (1996)] pokazano, że dla płynów prostych współczynnik przewodnictwa ciepłego pozostaje stały aż do gradientów temperatury rzędu 10^{10} deg/m. Z kolei, dla podobnych gradientów temperatury ($> 5 \cdot 10^9$ deg/m), obserwowano nieliniowy charakter współczynnika przewodnictwa ciepłego w symulacjach wykonanych techniką dynamiki molekularnej dla aluminium [Phonon thermal conductivity in nanolaminated composite metals via molecular dynamics, Ya Zhou et. al. J. Chem. Phys. 127, 184702 (2007)] .

- Pokazanie uniwersalnej (niezależnej od kształtu) zależności współczynnika przewodnictwa ciepłego ciekłego argonu od powierzchni przekroju nanokanału (Rysunek 3.11b).

- Identyfikacja procesów wpływających na fononowy transport ciepła w stałym argonie, podanie modelu opisującego przewodnictwo ciepła w nanodrutach i pozytywna weryfikacja przewidywań modelu przeprowadzonymi symulacjami (Rysunek 4.11).

W mojej opinii rozprawa napisana jest starannie i nie znalazłem w niej wielu omyłek. Kilka drobnych, to:

- użycie tego samego symbolu w różnych znaczeniach (τ w Równaniu 2.12 oraz na stronie 33),
- użycie różnych symboli do oznaczenia średniej (np. Równanie 4.28 i Rysunek 4.9).

- strona 48; Rysunek 3.7; dla jakiej średniej gęstości i temperatury otrzymano wyniki przedstawione na tym rysunku?

- strona 51;

Wyniki przedstawione na Rysunku 3.10 sugerują, że współczynnik przewodnictwa cieplnego ciekłego argonu maleje z temperaturą. Tymczasem wyniki przedstawione w Tabeli 3.1 pokazują efekt odwrotny. Gdzie jest omyłka?

- strona 50; We wzorach podanych w podpisach Rysunków 3.9 oraz 4.5 powinny być uwzględnione jednostki.

- Tabela 4.1; Błędne jednostki współczynnika przewodnictwa cieplnego.

- Tabela 5.1; Brak podanych jednostek w których wyrażono energie.

Z drugiej strony, autor nie zawarł wielu, istotnych informacji:

- co oznaczają błędy współczynnika przewodnictwa cieplnego przedstawione na wykresach i jak zostały oszacowane?

- Jaki argument fizyczny przemawia za wyborem $n=96$ w modelu potencjału twardego rdzenia (równanie 2.40)?

W rozprawie znalazłem kilka stwierdzeń o dyskusyjnym brzmieniu. Przedstawiam poniżej wybrane, tak, aby autor mógł dokładniej przedstawić swoje stanowisko w czasie obrony.

- Wprowadzenie, strona 13:

"procesy zachodzące w nanoskali mogą ... w ogóle w [układach makroskopowych] nie występować". Czy mógłbym prosić o przykład?

- pierwsze zdanie Rozdziału 2:

"Energia przekazywana z jednego układu do drugiego w skali atomowej bez wykonania pracy nazywana jest ciepłem".

Czy ciepłem jest proces, w którym wzbudzone cząsteczki jednego układu emitują kwanty światła, które wzbudzają cząsteczki innego układu?

- strona 29:

" Zakładając, że jony elektrolitu posiadają zerową wartościowość ...".

Czy istnieją jony o zerowym ładunku (wartościowości)?

- strona 29:

Podane w ostatniej linii na stronie rozwiązanie Równania 2.28 nie jest rozwiązaniem ogólnym.

- strona 45;

Zbieżność funkcji autokorelacyjnych do zera dla długich czasów nie jest warunkiem wystarczającym dla policzenia współczynnika transportu w oparciu o relacje Greena-Kubo.

- strona 56;

Rysunek 4.1 pokazuje duże różnice między wartościami współczynnika transportu dla stałego argonu policzonymi w oparciu o relacje Greena-Kubo oraz w oparciu o metodę Mullera-Plathe. Jak wyjaśnić to, że rozbieżność między metodami jest obserwowana dla stałego argonu? Czy podobne różnice były obserwowane w przypadku argonu ciekłego (w opisie Rysunku 3.2 nie opisano jaką metodą zostały one otrzymane)?

- strona 74;

Dla jakiej temperatury obliczono średnią szybkość fononów przedstawioną na Rysunku 4.8b? Jak objaśnić fakt, że średnia szybkość fononu rośnie, gdy jego energia dąży do zera?

Lektura rozprawy pozwala mi stwierdzić, że magister inżynier Krzysztof Hyżorek opanował nowoczesny warsztat symulacji mikroskopowych opartych o technikę dynamiki molekularnej. Wykonał obliczenia, których nakład obliczeniowy (przeliczony na pojedynczy procesor) przekroczył 50 lat. Zademonstrował swoje umiejętności w zakresie tworzenia modeli fizycznych badanych zjawisk i ich analizy otrzymanych wyników. Uzyskał wiele ciekawych rezultatów, między innymi te, o których wspomniałem powyżej.

Kończąc recenzję stwierdzam, że rozprawa doktorska magistra inżyniera Krzysztofa Hyżorka odpowiada warunkom określonym w ustawie o tytule naukowym i stopniach naukowych. Wnioskuje o dopuszczenie magistra inżyniera Krzysztofa Hyżorka do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



Jerzy Górecki