

Andrzej Burian  
Zakład Biofizyki i Fizyki Molekularnej  
Instytut Fizyki im. Augusta Chełkowskiego  
Uniwersytet Śląski

Katowice, dnia 20 września 2010 roku

**Ocena rozprawy habilitacyjnej doktora Konstantina Tretiakova**  
**„Symulacje komputerowe własności sprężystych wybranych układów modelowych**  
**i poszukiwanie mechanizmów auksetyczności”**  
**oraz jego dorobku naukowego**

Dr Konstantin Tretiakov ukończył studia wyższe na Homelskim Państwowym Uniwersytecie Technicznym, w katedrze Elektroniki Przemysłowej, pod kierunkiem profesora E. G. Abarinowa w 1994 roku. W latach 1995-2000 wykonywał pracę doktorską w Instytucie Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk w Poznaniu pod kierunkiem profesora Krzysztofa Wojciechowskiego i w 2000 roku uzyskał stopień doktora nauk fizycznych za pracę „Badanie stabilności mechanicznej i termodynamicznej modelowych układów wielu ciał za pomocą symulacji komputerowych”.

Przedłożona mi do recenzji rozprawa habilitacyjna **„Symulacje komputerowe własności sprężystych wybranych układów modelowych i poszukiwanie mechanizmów auksetyczności”** składa się z cyklu dziewięciu prac, które zostały opublikowane w renomowanych czasopismach o zasięgu międzynarodowym, takich jak Physical Review E (jedna praca), Journal of Chemical Physics (dwie prace), Journal of Physical Chemistry B (jedna praca), Reviews on Advanced Materials Science (jedna praca), Journal of Non-Crystalline Solids (trzy prace) i Physica Status Solidi B (jedna praca). W jednej pracy dr Konstantin Tretiakov jest jedynym autorem, w sześciu jest pierwszym autorem a w pozostałych dwóch drugim. Z dołączonych do dokumentacji oświadczeń współautorów wynika w sposób jednoznaczny, że wkład Habilitanta wniesiony do tych prac jest dominujący. Zestaw publikacji jest opatrzony dwudziestostronicowym przewodnikiem, w którym Autor streszcza treść prac stanowiących rozprawę habilitacyjną.

Tematyka prac jest skoncentrowana na badaniach właściwości sprężystych układów twardych i miękkich dysków oraz kul metodami symulacji komputerowych. Jednym z istotnych problemów, który Habilitant podejmuje w swojej rozprawie jest próba wygenerowania modelowego układu o ujemnym współczynniku Poissona, lub inaczej układu o właściwościach auksetycznych oraz „poszukiwanie mechanizmów auksetyczności” jak czytamy w tytule rozprawy. Intensywnie rozwijane prace w tej dziedzinie zostały zapoczątkowane pod koniec lat siedemdziesiątych ubiegłego wieku i dotyczyły kryształów metali o strukturze regularnej ściennie centrowanej. Odkrycie w 1987 roku przez Lakesa materiału o ujemnym współczynniku Poissona, którym była pianka poliuretanowa poddana kompresji a następnie obróbce termicznej powyżej temperatury mięknięcia i schłodzona pod ciśnieniem, znacznie rozszerzyła klasę tego typu materiałów. W późniejszych pracach znaleziono szereg nowych materiałów auksetycznych, takich jak pianka polietylenowa, mikroporowaty politetra-fluoroetylen, mikroporowaty polietylen o dużej masie cząsteczkowej, polipropylen, anizotropowe kompozyty, laminaty,  $\alpha$ -krystobalit, zeolity czy pianki węglowe. Mimo powszechnego przekonania, że właściwość auksetyczności występuje rzadko wśród krystalicznych ciał stałych wiele metali o strukturze regularnej rozciąganych wzdłuż kierunku [110] wykazuje ujemny współczynnik Poissona. Ta tematyka jest aktualna, ważna i interesująca zarówno ze względu na aspekt czysto poznawczy jak również na możliwości aplikacyjne tego typu materiałów.

Drogą do stwierdzenia auksetyczności jest wyznaczenie parametrów sprężystości badanego materiału, bądź to na drodze doświadczalnej bądź teoretycznej. Dr Konstantin Tretiakov wybrał metodę komputerowych symulacji w celu wyznaczenia tych parametrów oraz obliczenia współczynnika Poissona dla modelowych układów.

W pracy oznaczonej symbolem H1 zostały wyznaczone parametry sprężyste bezdefektowych układów twardych dysków w granicy gęstego upakowania. Zastosowano dwie metody obliczeniowe typu Monte Carlo. Pierwsza polegała na numerycznym różniczkowaniu energii swobodnej względem składowych tensora odkształceń w zespole  $N$ - $V$ - $T$ . W drugiej metodzie zastosowano analizę ewolucji pudła periodyczności w zespole  $N$ - $P$ - $T$ . Obie metody prowadzą do praktycznie identycznych wyników i jednocześnie wyniki uzyskane w tej pracy są zgodne z otrzymanymi przez innych autorów przy zastosowaniu innych metod obliczeniowych, w tym z wynikami teorii objętości swobodnej. Wyjątkiem jest niezgodność wyznaczonych modułów sprężystości poprzecznej (lub ścinających) z pracą Sengupty i współpracowników. Niższa wartość modułu ścinającego, otrzymana przez tych autorów, prowadzi do wyraźnie większego współczynnika Poissona. Głębszego odniesienia

się do tych różnic w wynikach obliczeń nie znajdujemy ani w pracy H1 ani w przewodniku. Analizując wpływ liczby dysków  $N$  na stałe sprężystości i współczynnik Poissona stwierdzono, że dla  $N=56$  i  $N=224$  wyniki różniły się o nie więcej niż kilka % od wartości otrzymanych z ekstrapolacji przy  $N \rightarrow \infty$ . Ponadto zauważono, że współczynnik Poissona obliczony w niezerowej temperaturze i w granicy gęstego upakowania jest o około 60% mniejszy niż wartość obliczona analitycznie w zerowej temperaturze przy użyciu potęgowego potencjału typu  $r^{-n}$  przy  $n \rightarrow \infty$ .

Podobne procedury numeryczne zostały zastosowane w pracy H2 do układów bezdefektowych i zdefektowanych sieci twardych kul ściennie centrowanych. Zostały one opracowane z uwzględnieniem trójwymiarowości badanego układu. Również w tym przypadku obie metody obliczeniowe prowadzą do takich samych wyników parametrów sprężystych badanego układu. Są również w dużym stopniu zgodne z wynikami publikowanymi przez innych autorów oraz z przewidywaniami teorii swobodnej objętości. Podobnie jak w przypadku twardych dysków wyniki symulacji przeprowadzonych dla 256 kul i ekstrapolowane przy  $N \rightarrow \infty$  różnią się o nie więcej niż kilka %. Wartości współczynnika Poissona obliczone dla przypadku statycznego są o około 40% wyższe od otrzymanych w pracy H2, co zdaniem Habilitanta świadczy o tym, że drgania termiczne powodują znaczne zmniejszenie tego parametru. Symulacje przeprowadzone w niskich temperaturach przy założeniu „miękkiego potencjału potęgowego” dla wykładników potęgowych  $n \geq 12$  prowadzą do wartości parametrów sprężystych zgodnych w granicach 2% z przewidywaniami modelu statycznego twardych kul. Natomiast w wyższych temperaturach zgodność tego rzędu uzyskano dla  $n \geq 384$ . Wprowadzenie do analizowanych układów defektów strukturalnych w postaci wakansów powoduje zwiększenie współczynnika Poissona. Podobną tendencję zaobserwowano w przypadku różnego typu defektów do układów dwuwymiarowych (odnośnik 20 pracy H2).

Kolejne dwie prace H3 i H4 są poświęcone analizie właściwości sprężystych uporządkowanych układów miękkich dysków i kul. W tym przypadku zastosowano metodę symulacji Monte Carlo w wersji zaproponowanej przez Parinello i Rahmana, polegającej na uśrednianiu fluktuacji odkształceń w zespole  $N-P-T$ . Ta metoda jest analogiczna do stosowanej w pracy H1 i H2 i wykorzystuje rozwinięcie swobodnej entalpii względem składowych tensora odkształceń. Oddziaływanie obiektów tworzących układ jest opisywane przez potęgowy potencjał typu  $r^{-n}$ . W tych pracach analizowano zależności objętościowego modułu sprężystości, modułu sprężystości poprzecznej oraz dodatkowo współczynników sprężystości dla przypadku trójwymiarowego od odwrotności wykładnika potęgowego funkcji



potencjału (lub parametru miękkości), ciśnienia i temperatury. Dla układów miękkich dysków i kul wyznaczono również współczynniki Poissona. Dla dysków wartości modułów objętościowego i ścinającego w niskich temperaturach są prawie takie same jak w przypadku statycznym. Są zgodne z wartościami uzyskanymi przez innych autorów i różnią się od wyników opublikowanych przez Senguptę i współpracowników. Zależności modułów objętościowego i ścinającego od wykładnika potęgowego funkcji potencjału różnią się wyraźnie i są zbieżne do wartości tych parametrów dla modelu statycznego w niskich temperaturach. Podobną tendencję wykazuje zależność współczynnika Poissona. Z zależności temperaturowych współczynnika Poissona wynika, że dla  $n \geq 30$  drgania termiczne prowadzą do niższych jego wartości natomiast dla  $n \leq 30$  do wyższych w stosunku do wartości dla modelu statycznego. Z analizy wpływu ciśnienia na współczynnik Poissona wynika, że jest on słaby w przypadku miękkich potencjałów natomiast większy dla potencjałów twardych. W każdym z analizowanych przypadków dla dużych wartości  $n$  otrzymano wyniki zgodne z wartościami przewidywanymi dla twardych dysków. Jako uporządkowany układ miękkich sfer rozważano strukturę regularną ściennie centrowaną. Podobnie jak dla miękkich dysków obliczenia numeryczne wykazały wyraźną zależność parametrów sprężystych takiego układu od wykładnika potęgowego funkcji potencjału oraz od temperatury. Otrzymane wyniki są wewnętrznie spójne z przewidywaniami dla przypadków statycznych i twardych potencjałów. Ważnym wynikiem pracy H4 jest ujemna wartość współczynnika Poissona w kierunku [110].

W publikacji H5 współczynnik Poissona jest analizowany dla uporządkowanych układów miękkich dysków o dwóch i wielu rozmiarach. W ostatnim przypadku założono gaussowski rozkład średnic dysków. Symulacje komputerowe przeprowadzono, podobnie jak w poprzednich pracach, metodą Monte Carlo w zespole  $N$ - $P$ - $T$  przy założeniu potencjału potęgowego w zależności od wykładnika potęgowego, temperatury i stopnia dyspersji dysków. Stwierdzono, że dla miękkich potencjałów oddziaływań wartości współczynników Poissona są prawie równe, niezależnie od temperatury. Zwiększenie dyspersji rozmiarów dysków lub zmniejszenie temperatury dla miękkich potencjałów powoduje zwiększenie współczynnika Poissona.

W kolejnych pracach H6-H9 analizowane są układy dwuwymiarowe, takie jak twarde dyski, dimery, cykliczne trymery, tetrametry, heksamery, pentametry i heptamery. W pracach H6-H8 użyto metody symulacyjnej Monte Carlo w zespole  $N$ - $P$ - $T$ , analogicznej jak w poprzednich pracach. Natomiast w pracy H9 zaproponowano rozszerzenie metody fluktuacyjnej do obliczeń parametrów sprężystości i współczynnika Poissona. Dla bezdefektowego i aperiodycznego układu twardych dimerów (praca H6) zaproponowano trzy

mechanizmy redukcji współczynnika Poissona. Pierwszy polega na zwiększeniu stosunku ciśnienie/temperatura. Gdy ten stosunek  $\rightarrow \infty$  lub inaczej, gdy układ osiąga granicę gęstego upakowania, współczynnik Poissona jest prawie trzy razy mniejszy niż w przypadku twardych dysków. Drugi mechanizm prowadzi do wartości tego współczynnika dla fazy aperiodycznej systematycznie mniejszej niż dla układu twardych dysków o takiej samej gęstości. Trzeci mechanizm jest związany z wyraźnym zmniejszeniem współczynnika Poissona w wyższych temperaturach w porównaniu z układem statycznym. Wprowadzenie defektów w postaci wakansów do fazy aperiodycznej w sposób losowy powoduje zwiększenie współczynnika Poissona. W pracy H7 wyznaczono parametry sprężystości dla układów twardych dysków, twardych dimerów, twardych cyklicznych trimerów i heksamerów tworzących płaskie, izotropowe fazy stałe. Analizowane były układy periodyczne i aperiodyczne. Z przeprowadzonych obliczeń wynika, że geometria molekuł ma istotny wpływ na właściwości sprężyste układu i otrzymane wyniki są zgodne z opisem bazującym na teorii swobodnej objętości dla rozpatrywanych układów. W szczególności wartości współczynnika Poissona wzrastają monotonicznie jako funkcje względnej objętości liczonej w stosunku do objętości odpowiadającej najgęstszemu ułożeniu. W dobrym przybliżeniu ta zależność jest liniowa. Dla ustalonej objętości względnej wartości współczynników Poissona zmniejszają się stopniowo od wartości charakterystycznych dla dysków, poprzez dimery, tryмеры aż do heksamerów. Przy czym dla układów aperiodycznych są one większe niż dla periodycznych. Ponadto dla trymerów i heksametrów badane układy wykazują właściwości auksetyczne. Najniższą wartość (ujemną) współczynnika Poissona otrzymano dla twardych cyklicznych tetrametrów w pracy H8. W pracy H9 badano właściwości sprężyste dwuwymiarowych układów twardych, cyklicznych pentametrów i heptamerów o gęstym upakowaniu. Wyznaczone parametry sprężyste pozwoliły obliczyć współczynniki Poissona. Dla najgęściej upakowanych układów heptamerów otrzymano ujemne wartości.

Oceniając wartość naukową rozprawy chciałbym na wstępie podkreślić rozsądny dobór prac stanowiących jej podstawę. W tym wyborze widać konsekwencję w dążeniu do realizacji celu, jaki został sformułowany w przewodniku. Autor w umiejętny sposób rozwija istniejące metody komputerowe wyznaczania parametrów sprężystości oraz proponuje nowe podejścia do tych zagadnień. Używa do tego proste potencjały typu odpychającego: twardy i miękki potęgowy. Opracowane metody obliczeniowe pozwoliły mu na przetestowanie proponowanych rozwiązań dla układów modelowych poprzez porównanie z wynikami otrzymanymi przez innych autorów, przetestowanie zachowania się wyznaczonych



przebiegów parametrów sprężystych w funkcji temperatury, ciśnienia, względnej objętości, wykładnika potęgowego potencjału i liczby molekuł w przypadkach granicznych – w warunkach statycznych ( $T \rightarrow 0$ ), najgęstszego upakowania, w przybliżeniu twardego potencjału potęgowego ( $n \rightarrow \infty$ ). Te porównania wykazują wewnętrzną spójność uzyskanych wyników, ich zgodność z wynikami literaturowymi (z wyjątkiem prac Sengupty i współpracowników) oraz zgodność z przewidywaniami teorii objętości swobodnej. To świadczy o wartości naukowej prac doktora Konstantina Tretiakova. Za najbardziej wartościowy wynik przedstawionej mi do oceny rozprawy uważam wygenerowanie modeli charakteryzujących się ujemnym współczynnikiem Poissona przy użyciu prostego odpychającego potencjału. Natomiast pewien niedosyt wywołuje w mojej opinii brak odniesienia się Autora do licznych wyników doświadczalnych, dostępnych w wielu publikacjach. A takie odniesienie znacznie wzmocniłoby wydzwięk sformułowań pojawiających się w tytule rozprawy „...i poszukiwanie mechanizmów auksetyczności” oraz na końcu przewodnika „*Nasze badania wskazują kierunek eksperymentalnych poszukiwań rzeczywistych układów z własnościami auksetycznymi oraz pomagają zrozumieć mechanizmy prowadzące do takich zachowań*”. Podsumowując ocenę wartości naukowej prac rozprawy stwierdzam, że spełnia ona wymagania stawiane pracom habilitacyjnym.

Całkowity dorobek naukowy Habilitanta to 28 opublikowanych prac, w tym 22 w czasopismach z listy filadelfijskiej. Jest to wynik dobrze uzasadniający starania o uzyskanie stopnia doktora habilitowanego. Tym bardziej, że większość prac została opublikowana w renomowanych czasopismach, w tym w *Nature*, *Physical Review E* i *Journal of Chemical Physics*, *Journal of Physical Chemistry* i *Journal of Physics: Condensed Matter*. W tym miejscu chciałbym podkreślić wysoką jakość dorobku naukowego Habilitanta. To stwierdzenie jest jeszcze poparte liczbami cytowań. Ogólna liczba cytowań wszystkich prac wynosi 196 (112 bez autocytowań), według bazy Web of Science w chwili pisania recenzji. Współczynnik  $h$  według tej samej bazy wynosi 8. Są to liczby wyraźnie większe od podanych w autoreferacie, co świadczy o stale rosnącym zainteresowaniu pracami Habilitanta w międzynarodowym środowisku naukowym. Praca H9 uzyskała liczbę cytowań 29. Jest to, moim zdaniem, bardzo dobry wynik. Ponadto dr Konstantin Tretiakov wygłosił 11 referatów na konferencjach i seminariach oraz przedstawił 13 komunikatów w formie referatów (4) i plakatów (9).

Dr Konstantin Tretiakov prowadził aktywną współpracę międzynarodową. Przebywał na dwuletnim stażu naukowym w Centrum Fizyki Teoretycznej w Trieście, we Włoszech oraz na jednorocznym stażu na Uniwersytecie Northwestern w Evanston, w Stanach Zjednoczonych. Ponadto w latach 2000-2009 odbył szereg krótkich staży w ośrodkach zagranicznych (od 2 tygodni do 1 miesiąca). Ta współpraca naukowa wzbogaciła i rozszerzyła jego warsztat naukowy. Dzięki niej dorobek naukowy Habilitanta nie ogranicza się jedynie do zagadnień związanych z komputerowymi symulacjami właściwości sprężystych ciał stałych, ale dotyczy również badań nad przewodnictwem cieplnym argonu w fazie stałej, dynamiką samo-organizujących się układów, mechanizmami adsorpcji nanocząsteczek oraz fotoprzewodnictwem w warstwach funkcjonalizowanych nanocząsteczek metali. Taki niemonotematyczny charakter zestawu wszystkich prac dobrze rokuje na przyszłość Kandydata na samodzielnego pracownika naukowego i świadczy o jego szerokiej wiedzy, dojrzałości jak również zdolności do podejmowania oraz rozwiązywania różnych problemów naukowych.

Dr Konstantin Tretiakov do roku 2009 brał udział w realizacji sześciu projektów badawczych finansowanych przez Komitet Badań Naukowych a później przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego. W jednym projekcie był kierownikiem, w jednym głównym wykonawcą a w czterech wykonawcą. Świadczy to o zdolności do zdobywania środków na badania naukowe oraz o umiejętności pracy w zespole badawczym. Te doświadczenia będą cenne w przyszłej pracy naukowej. Habilitant brał udział w organizowaniu trzech konferencji. Jego działalność dydaktyczna polegała na sprawowaniu opieki nad dwoma doktorantami. Zapewne ze względu na charakter Instytutu Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk, z którym związał się po ukończeniu studiów i pracuje do dzisiaj, nie znalazłem informacji o prowadzeniu zajęć dydaktycznych ze studentami. W tym świetle oceniam dobrze jego działalność organizacyjną

Biorąc pod uwagę przedstawione powyżej oceny rozprawy habilitacyjnej, dorobku naukowego i organizacyjnego doktora Konstantina Tretiaka z pełnym przekonaniem wnioskuję o dopuszczenie go do dalszych etapów postępowania, w myśl ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym.

ABurian