

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

Rada Naukowa
Instytutu Fizyki Molekularnej PAN
Ul M. Smoluchowskiego 17
60-179 Poznań

Recenzja rozprawy habilitacyjnej dr Jakuba Wojciecha Narojczyka pt
Wpływ nanoinkluźji na własności sprężyste wybranych układów modelowych twardych
cząstek

Rozprawa habilitacyjna dr Jakuba Wojciecha Narojczyka pt. „*Wpływ nanoinkluźji na własności sprężyste wybranych układów modelowych twardych cząstek*” zawiera 10 publikacji. W większości publikacji jest kilku współautorów, natomiast dr Narojczyk jest pierwszym autorem wszystkich 10 publikacji. Z tych dziesięciu publikacji cztery zostały opublikowane w Physica Status Solidi B, trzy w Materials, dwie w Computational Methods in Science and Technology oraz jedna w Physical Review E. Z tych publikacji praca w Phys. Rev E i trzy prace w Materials mogą być uznane za opublikowane w bardzo dobrych czasopismach, cztery prace w Physica Status Solidi B są w czasopiśmie o mniejszym znaczeniu, natomiast Computational Methods in Science and Technology nie ma impact factora, a więc jest czasopismem drugorzędnym. Naturalnie 10 prac w ramach rozprawy habilitacyjnej wystarcza do spełnienia podstawowych wymogów związanych z nadaniem stopnia doktora habilitowanego.

Zgodnie z bazą naukową Scopus dr Jakub Wojciech Narojczyk jest autorem i współautorem 35 publikacji naukowych. Z tego oprócz 8 publikacji będących przedmiotem rozprawy pozostaje jeszcze dodatkowo 27 publikacji po obronie stopnia doktora. Jest to bardzo niejednorodny zbiór, jest w nim np. publikacja poświęcona ruchowi komórek raka przez analogie do błędzenia Levy w Nature Communications, też dwie prace dotyczące własności paneli drewnianych, czy też prace dotyczące cząsteczek oddziałujących potencjałem Yukawy, czyli w zasadzie ekranowanym potencjałem kulombowskim. Generalnie te osiągnięcia tworzą zbiór mieszanych zagadnień i sprawiają wrażenie poszukiwania ciekawych problemów badawczych do rozwiązania. Ogólnie jest to zbiór znaczący choć nie wybitny.

Dr Narojczyk przedstawiał wiele doniesień na konferencjach międzynarodowych w formie prezentacji ustnych i posterowych. Ponadto realizował 2 projekty badawcze przed uzyskaniem stopnia doktora, w tym jeden jako główny wykonawca oraz 5 po uzyskaniu stopnia doktora w tym jeden jako kierownik projektu.

Rozprawa habilitacyjna dr Narojczyka poświęcona jest materiałom auksetycznym, tzn. nietypowym strukturom w których ściskanie w jednym kierunku, czyli zmniejszenie wymiaru ciała stałego wzdłuż jednej osi prowadzi do zmniejszenia jego rozmiarów w kierunkach prostopadłych. Podobnie zwiększenie jego rozmiarów prowadzi do zwiększenia rozmiarów w kierunkach prostopadłych. Jest to nietypowe zachowanie, w typowych sytuacjach jest odwrotnie. Pierwszy przykład struktury auksetycznej został zaprojektowany przez K. Pietscha w 1978 roku. Jest on więc uznawany za wynalazcę sieci auksetycznych. Samo zjawisko tak nazwał prof. K. Evans z Uniwersytetu Exeter w 1991 roku. Zjawisko auksetyzmu było też opublikowane jako przykład sieci o ujemnym współczynniku Poissona przez G. Kołpakowa w 1985 roku. Zachowanie auksetyczne było zidentyfikowane w szeregu

materiałów, w tym w piance poliuretanowej, w pewnym typach grafenu, w α – krystobalicie, itp. Nie ulega więc wątpliwości że samo zjawisko jest już zidentyfikowane, główny kierunek badań obecnie to scharakteryzowanie tego zjawiska.

Należy podkreślić że zjawisko auksetyzmu zawiera w sobie również pewną sprzeczność. Oddziaływania molekularne są odpychające na bliskiej odległości, przyciąganie dominuje na odległościach dalszych, i zanika z odległością, więc można oczekiwać że ściskanie wzdłuż jednego kierunku będzie kompensowane przez rozszerzenie w innych, ze względu na optymalizację energii układu. Dlatego proste struktury krystalograficzne, składające się z atomów/cząsteczek o standardowych hamiltonianach oddziaływań nie powinny wykazywać zachowań auksetycznych. Należy więc projektować i badać specyficzne układy dla takich zachowań, i w tym zakresie koncentrowała się aktywność będąca przedmiotem rozprawy dr Narojczyka. Można zauważyć że w ogólności projektowanie układów auksetycznych nie jest trudne, łatwo zaprojektować przykładowy mechanistyczny model układu auksetycznego. Wystarczy skonstruować ślimakową przekładnię która rozszerza się przy wyciąganiu. Umieszczenie wielu takich przekładni w sieci tak aby się odpychały prowadzi do ich jednoczesnego przedłużenia i rozszerzenia. Problemem trudnym jest konstrukcja modeli realistycznych.

Dr Narojczyk badał układy twardych sfer, z włączeniami sfer o większym lub mniejszym promieniu w formie atomowych kolumn i płaszczyzn. Autor stwierdza że w układach jednorodnych twardych sfer o symetrii regularnej dla gęstego upakowania własności auksetyczne występują w przypadku naprężenia wzdłuż kierunku [110]. Stosowane włączenia były używane dla zbadania czy te własności są zmieniane pod wpływem włączeń sfer o promieniach różnych od promieni matrycy, czyli jednorodnej sieci regularnej. W przypadku kolumn były to atomy ułożone wzdłuż kierunku krystalograficznego, jeden lub kilka atomów, w przypadku płaszczyzn były to pojedyncze warstwy atomów ułożone wzdłuż płaszczyzny krystalograficznej. We wszystkich przypadkach były to struktury nieskończone, tzn. nieskończony rząd atomów wzdłuż prostej bądź warstwa atomowa nieskończona wzdłuż dwu kierunków.

Publikacje H1 i H2 dotyczą włączeń twardych sfer o innym promieniu w układ twardych sfer o sieci regularnej płasko centrowanej, czyli gęstego upakowania. Jest to zamiana sfer na obiekty o promieniu wyższym lub niższym ułożone wzdłuż kierunków [001]. Prowadzi to do zamiany symetrii sieci z regularnej na tetragonalną. W efekcie dla przypadku promieni większych powoduje to istotną zmianę współczynników elastycznych układu. W tym przypadku niektóre ze współczynników S_{ij} rosną, natomiast inne współczynniki maleją. W przypadku współczynników podatności S_{12} , S_{23} , S_{13} mają one wartości ujemne. Natomiast dla włączenia sfer o promieniach niższych nie ma znaczącej zmiany własności elastycznych. Analizując te zależności w pracach H1 i H2 wskazano obszar ujemnych wartości współczynników Poissena, tzn. własności auksetycznych.

Publikacja H3 dotyczy włączeń sfer o innym promieniu w postaci płaszczyzn (001). Wyniki otrzymano w funkcji stosunku promieni sfer matrycy i włączenia. W zasadzie symulowana jest pojedyncza warstwa, jednak periodyczne warunki brzegowe powodują że odpowiada to układowi równoległych warstw o określonej odległości. Jak poprzednio wartości współczynników podatności elastycznych S_{ij} są różne dla promieni większych i mniejszych. W przypadku promieni mniejszych, zależność jest nieznaczna, natomiast w przypadku promieni większych od promieni matrycy zmiana jest zasadnicza, te wartości zmieniają się istotnie. Jak poprzednio, współczynnik w kierunku prostopadłym S_{12} jest ujemny i zmienia się o czynnik rzędu 3 dla stosunkowo niewielkich zmian promieni sfer, około 0.04. Zmianie ulegają również współczynniki dla odkształceń ścinających. Natomiast współczynniki równoległe do płaszczyzn w zasadzie się nie zmieniają. Porównanie wykazało że zmiana tych samych współczynników jest wyższa dla potencjału Yukawy niż dla twardych sfer.

Kolejna praca H4 zawiera bardziej skomplikowane obszary włączeń sfer o innym promieniu. Są to płaszczyzny równoległe połączone kanałami w kierunkach prostopadłych. W pracy pokazano że, podobnie jak poprzednio, stosunkowo niewielka zmiana promieni powoduje silną zmianę

współczynników podatności elastycznej S_{ij} . W szczególności powoduje to usunięcie własności auksetycznych dla kierunków $[110]$ oraz $[1-10]$, obserwowanych dla idealnego układu regularnego.

Praca H5 jest kontynuacją pracy H4, zajmuje się również wpływem kanałów prostopadłych na własności auksetyczne. Rozpatrywano układy trzech prostopadłych kanałów, z tym że te kanały te mogą się przecinać lub nie. Wyniki są podobne do poprzednich, współczynniki elastyczne zmieniają się znacząco wyłącznie dla sfer o większym promieniu. W przypadku włączeń sfer o mniejszym promieniu, współczynniki elastyczne w zasadzie nie ulegają zmianie. W przypadku sfer o większym promieniu, kanały przecinające się powodują usztywnienie sieci i usunięcie własności auksetycznych. Identyczne zachowanie jest obserwowane w przypadku kanałów nie przecinających się.

Kolejna praca H6 poświęcona jest podobnym zagadnieniom. Wprowadzane są kanały prostopadłe, skierowane wzdłuż osi głównych sieci, przecinające się lub nie. Wyniki dotyczące stałych elastycznych są podobne do pracy poprzedniej. Istotnym dodatkiem jest analiza stałej Poissona. W moim przekonaniu jest to wyłącznie zabieg promocyjny, dotyczący nowej klasy zjawisk. Elementarny, zupełny opis wymaga podania stałych elastycznych, np. w postaci macierzy S_{ij} . Pozostałe omówienia są wtórne, więc nie ma potrzeby się nimi w tej ocenie zajmować.

Kolejna praca H7 dotyczy układu kanałów równoległych, skierowanych wzdłuż jednej z osi głównych, tworzących dwuwymiarową sieć kwadratową. Są to więc kanały znajdujące się równej odległości od siebie. Istotnym nowum jest użycie kanałów zawierających nie pojedyncze, a wielokrotne ciągi twardych sfer o innym promieniu. W sumie jest to więc inny przekrój kanałów, które są konfigurowane tak aby tworzyły dwuwymiarową sieć kwadratową, układ przechodzi do symetrii tetragonalnej. Wyniki wskazują że stałe elastyczne nie ulegają zmianie przy promieniach sfer włączonych mniejszych od promieni sfer matrycy. W przypadku większych promieni sfer włączenia, stałe te ulegają zmianie, przy czym stałe elastyczne dla kierunków wzdłuż kanałów zwiększają swoje bezwzględne wartości, w tym również te które są ujemne. W przypadku kanałów o zmiennym rosnącym przekroju występuje niemonotoniczne zachowanie, ale analizy tego zachowania nie ma.

Kolejna praca H8 dotyczy kanałów z zmiennym przekroju, jednak skierowanych wzdłuż przekątnych sześciangu, tzn. w kierunkach rodziny $[111]$. Kanały te przecinają się. Wyniki wskazują na brak zmiany współczynników S_{ij} dla promieni sfer włączenia mniejszych od promieni sfer matrycy. Istotna różnica w polega na tym że dla promieni większych, zależność jest w zasadzie liniowa, z załamaniem dla równych wartości promieni włączenia i matrycy.

Przedostatnia praca z cyklu H9, jest opublikowana w najbardziej znaczącym czasopiśmie, Physical Review E. Jednak z punktu widzenia metodologicznego jest zwykłą kontynuacją prac poprzednich. Zajmuje się wpływem włączeń w postaci kanałów o zmiennym przekroju, ułożonych wzdłuż rodziny kierunków $[110]$, tzn. $\langle 110 \rangle$. Praca ta pokazuje wyniki dotyczące stałych elastycznych, jednak nie S_{ij} , lecz B_{ij} . Wyniki są analogiczne. W podsumowaniu stwierdza się że obecność kanałów redukuje własności auksetyczne obserwowane dla jednorodnych układów regularnych twardych sfer.

Ostatnia praca H10 zawiera podobne wyniki dla układów w których wypełnienie jest w postaci twardych molekuł dwuatomowych i dla twardych sfer. Wyniki dają spójny obraz, w przypadku molekuł i twardych sfer.

Istotnym problemem w zrozumieniu tych prac jest sposób prezentacji wyników, który dramatycznie utrudnia czytelnikowi zadanie. I należy przyznać że jest to postępowanie spójne, dotyczy wszystkich prac. Opisy pod ilustracjami słabo, albo zupełnie nie określają co jest na rysunkach. Ponadto pojawia się zwykle 21 zależności na jednym wykresie, symbole nakrywają się, gdyż bardzo często są to zależności identyczne luba prawie identyczne. Nie da się tego łatwo odróżnić, czasem w ogóle to jest niemożliwe. Obraz który się uzyskuje się jest ogromny pod względem ilościowym, ale często są to zespoły prawie identycznych zależności.

W podsumowaniu cyklu tych prac można stwierdzić że otrzymano spójny obraz zachowania układów twardych sfer pod wpływem różnorodnych geometrycznie modyfikacji polegających na wprowadzeniu sfer o innym promieniu w różnych układach geometrycznych. Autor wykazuje że te włączenia dają spójny obraz, w przypadku sfer o mniejszym promieniu zmiana jest w zasadzie zaniedbywalna, w przypadku sfer o promieniu większym zmiana prowadzi do istotnej modyfikacji stałych elastycznych, w tym do redukcji lub nawet usunięcia własności auksetycznych dla układów jednorodnych twardych sfer. Jest to ważne osiągnięcie poznawcze. W zasadzie można spekulować o zastosowaniu tych wyników przy projektowaniu materiałów kompozytowych. Oczywiście wyniki są uzyskane dla specyficznych oddziaływań, zastosowana metoda pozwala jednak na rozszerzenie tych badań na układy o innych hamiltonianach co otwiera nowe kierunki badań w przyszłości. Jest to więc znaczące i perspektywiczne osiągnięcie naukowe, wymaga jednak dalszej intensywnego rozwoju i pracy nad bardziej realistycznymi układami.

Podsumowując ocenę dorobku naukowego stwierdzam że dr Narojczyk spełnia wymogi związane z uzyskaniem stopnia doktora habilitowanego. W związku z tym zgodnie z Art. 219 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 roku Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dziennik Ustaw 2018 poz. 1668), ze zmianami (Dziennik Ustaw 2023 poz. 212) wnioskuję do Rady Naukowej Instytutu Fizyki Molekularnej PAN o dopuszczenie dr Jakuba Wojciecha Narojczyka do dalszego postępowania kwalifikacyjnego w celu nadania stopnia doktora habilitowanego nauk fizycznych.

Prof. dr hab. Stanisław Krukowski

Warszawa 02.06.2024