

Warszawa, 16 kwietnia 2008

## Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Łukasza Badowskiego pt. „*Dyfuzja kolektywna w niejednorodnych układach oddziałujących*”

Rozprawa doktorska pt. „*Dyfuzja kolektywna w niejednorodnych układach oddziałujących*” została przygotowana przez mgr Łukasza Badowskiego pod kierunkiem doc. dr hab. Magdaleny Załuskiej-Kotur, w Zakładzie Optyki Kwantowej Instytutu Fizyki PAN w Warszawie.

Zgodnie z *Ustawą o stopniach naukowych i tytule naukowym*, celem recenzji jest stwierdzenie, czy rozprawa doktorska stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego oraz wykazuje ogólną wiedzę teoretyczną kandydata w danej dyscyplinie naukowej, a także umiejętność prowadzenia pracy naukowej.

Praca doktorska stawia sobie za cel opis teoretyczny dyfuzji kolektywnej oddziałujących cząstek w potencjałach periodycznych, w ogólności niejednorodnych. Układ ten modelowany jest za pomocą jednowymiarowego gazu sieciowego identycznych cząstek. Energia układu jest sumą energii cząstek w węzłach zewnętrznie zadanego potencjału periodycznego oraz energii oddziaływania (przyciągającego lub odpychającego) najbliższych sąsiadów. W każdym węźle może znajdować się co najwyżej jedna cząstka. Dyfuzja cząstek odbywa się poprzez przeskoki do sąsiednich węzłów sieci, z częstością zależną od energii węzła, z którego wyskakuje cząstka, oraz od wysokości barier energetycznych pomiędzy węzłami. Wysokość ta może ulegać zmianie na skutek oddziaływania przeskakującej cząstki z cząstką sąsiednią (lub dwiema sąsiednimi cząstkami w przypadku oddziaływań trójcząstkowych). Częstości te tworzą macierz przeskoków, która występuje w równaniu master dla wektora prawdopodobieństw napotkania cząstki w kolejnych węzłach. Współczynnik dyfuzji kolektywnej obliczany jest na podstawie najmniejszej wartości własnej transformaty Fouriera macierzy przeskoków, proporcjonalnej do  $k^2$ , w granicy termodynamicznej i  $k \rightarrow 0$ .

Dla układów jednorodnych i cząstek oddziałujących tylko poprzez zmianę energii węzłów, w których się znajdują, współczynnik dyfuzji wyznaczono znaną metodą kombinatoryczną, w analogii do wielkiego zespołu kanonicznego. Uzyskano wyniki w całym zakresie gęstości, zarówno dla oddziaływań odpychających jak i przyciągających.

Następnie skonstruowano nową metodę wariacyjną, o znacznie szerszym zakresie stosowalności, opartą na formalizmie macierzy przejścia. Przetestowano ją dla analizowanych metodą kombinatoryczną układów i odtworzono wcześniejsze wyniki. Metoda wariacyjna ma jednak znacznie szerszy zakres stosowalności. A zatem użyto jej także do obliczenia współczynnika dyfuzji układów cząstek z bardziej złożonym oddziaływaniem: dwucząstkowym z dodatkową zmianą wysokości bariery i trójcząstkowym. Wyznaczono dyfuzję zarówno w modelowych układach jednorodnych, jak i niejednorodnych (z okresem dwa lub potencjałem Ehrlicha-Schwoebla modelującym stopnie). Dla wybranych układów przeprowadzono symulacje numeryczne metodą Monte Carlo i uzyskano zgodność z wynikami analitycznymi.

Główny wynik pracy doktorskiej to skonstruowanie nowej metody wariacyjnej i zastosowanie jej do wyznaczenia dyfuzji kolektywnej oddziałujących cząstek w kilku modelowych układach, zarówno jednorodnych jak i niejednorodnych, dla których wyniki nie były dotychczas znane w literaturze.

Nowa metoda zaproponowana w rozprawie świadczy o tym, że doktorant nie tylko zgromadził potrzebne podstawy teoretyczne w zakresie fizyki statystycznej, ale także nabył umiejętność ich kreatywnego stosowania.

Sposób przedstawienia zdobytej wiedzy i uzyskanych wyników pozostawia jednak niedosyt. Pewna część wzorów rozprawy zawiera błędy (np. równania 11, 31, 33, 108), niektóre ważne wielkości nie są zdefiniowane (np.  $\Delta U$  i  $\Delta B$  wprowadzone na rys. 2 i 3), pojawiają się mylące sformułowania (np. zdanie pod równaniem 122, porównanie równania 122 ze 150), co znacznie utrudnia zrozumienie modelu, metod i wyników. Mama nadzieję, że uwagi te skłonią doktoranta do refleksji nad własnym tekstem, zwłaszcza w znacznie szerszym kontekście skuteczności procesu uczenia i komunikowania wiedzy.

Podsumowując, wyniki zawarte w pracy doktorskiej stanowią oryginalne rozwiązanie fundamentalnego problemu fizyki statystycznej: wyznaczenia dyfuzji kolektywnej oddziałujących cząstek w niejednorodnym potencjale periodycznym. Opracowana w rozprawie metoda wariacyjna obliczania współczynnika dyfuzji dla jednowymiarowego gazu sieciowego przy użyciu macierzy przejścia jest nowatorska i stosuje się do niezbadanych dotąd klas układów (oddziałujące, niejednorodne, w całym zakresie gęstości). Jej wyniki zgadzają się z przeprowadzonymi w pracy symulacjami komputerowymi. Przygotowanie rozprawy doktorskiej wymagało od kandydata zdobycia szerokiej wiedzy teoretycznej w zakresie fizyki statystycznej. Opracowanie nowej metodyki stworzyło naturalne warunki do kształcenia i doskonalenia przez doktoranta umiejętności samodzielnego prowadzenia badań naukowych. Tak więc recenzowana praca spełnia wymogi stawiane rozprawom doktorskim przez *Ustawę o stopniach naukowych i tytule naukowym*, a jej wyniki mają istotne znaczenie poznawcze. Dlatego wnoszę o przyjęcie rozprawy doktorskiej pt. „*Dyfuzja kolektywna w niejednorodnych układach oddziałujących*” oraz dopuszczenie mgr Łukasza Badowskiego do jej publicznej obrony.



doc. dr hab. Maria L. Ekiel-Jezewska