

Recenzja rozprawy doktorskiej pana mgr. Łukasza Badowskiego
p.t. *Dyfuzja kolektywna w niejednorodnych układach oddziałujących*

Praca doktorska pana mgr. Łukasza Badowskiego, wykonana pod kierunkiem doc. dr hab. Magdaleny Załuskiej-Kotur, dotyczy ciekawego zagadnienia fizyki statystycznej, jakim jest dyfuzja w układach, w których istotną rolę gra oddziaływanie między cząsteczkami.

Procesy dyfuzyjne były i są badane w przeróżnych kontekstach. Bezpośrednią motywacją badań przedsięwziętych przez autora były, o czym pisze w *Preliminariach*, zjawiska zachodzące w wyniku adsorpcji gazu na powierzchniach ciał krystalicznych. Uzasadnia to wybór modelu gazu sieciowego jako obiektu badań – zaadsorbowane cząstki zajmują na powierzchni kryształu określone miejsca wyznaczone przez periodycznie rozłożone minima potencjału wiążącego cząstki gazu, a dyfuzja przebiega na skutek przeskoków między sąsiednimi minimami. W przypadku dużej liczby adsorbowanych cząstek – porównywalnej z liczbą minimów potencjału – istotne staje się uwzględnienie faktu, iż już zajęte przez jakąś cząstkę minimum potencjału nie może (lub może w ograniczonym stopniu) związać cząstkę następną, ponadto zaadsorbowane cząstki mogą deformować potencjał. Konieczne więc jest uwzględnienie takich zjawisk w postaci efektywnego oddziaływania między cząsteczkami. W swojej pracy doktorskiej mgr Badowski zajmuje się przypadkiem, w którym uwzględnione jest blokowanie węzłów sieci poprzez założenie, że w każdym z nich może znajdować się tylko jedna cząstka, a dodatkowo występują oddziaływania między najbliższymi sąsiadami.

Podstawowym narzędziem wykorzystanym w pracy do analizy dyfuzji w wyżej opisanym układzie jest równanie master. Autor stosuje je do przypadku jednowymiarowego, co w połączeniu ze wspomnianym powyżej założeniem o ograniczeniu zasięgu oddziaływań do najbliższych sąsiadów oznacza, że przeskoki z danego węzła mogą przenieść cząsteczkę do jednego z dwóch węzłów sąsiednich. Problem, kiedy takie przybliżenie może w miarę dobrze opisywać rzeczywistą dyfuzję gazu zaadsorbowanego na powierzchni dwuwymiarowego kryształu nie jest, w zasadzie, poruszany w pracy.

Poszukiwany przez autora współczynnik dyfuzji kolektywnej wyznaczony jest przez najmniejszą wartość własną macierzy częstości przeskoków między węzłami, co umożliwia poszukiwanie jej metodą wariacyjną, która jest punktem wyjścia rozważań autora.

Pierwszym oryginalnym wkładem pana mgr. Badowskiego do rozwiązania problemu jest rozwinięcie metod kombinatorycznych znajdowania rozwiązania problemu wariacyjnego, tak iż możliwe stało się ich zastosowanie do układów, w których cząstki oddziałują nie tylko poprzez blokowanie miejsc, ale też poprzez nietrywialne modyfikacje lokalnych potencjałów i to dla szerokiej klasy takich modyfikacji. Rozwinięta metoda pozwala też uwolnić się od konieczności stosowania różnych przybliżeń w zależności od gęstości układu. Otrzymane wyniki analityczne autor uzupełnił o symulacje numeryczne.

Równie ważnym wynikiem badań pana mgr. Badowskiego jest efektywne rozszerzenie metody macierzy przejścia, co pozwala na badanie dyfuzji w sieciach niejednorodnych, tzn. takich, w których występują węzły o różnych wartościach potencjału. Autor rozważa przypadek, gdy niejednorodności te powtarzają się periodycznie, co ma np. miejsce w wypadku, kiedy na powierzchni kryształu, na której zachodzi adsorpcja występują stopnie na skutek cięcia kryształu skośnie do płaszczyzn głównych.

Jak słusznie zauważa autor rozwinięte przez niego metody mogą znaleźć zastosowanie do badania dyfuzji na sieciach przypadkowych i nieperiodycznych. Nieco bardziej sceptyczny jestem w stosunku do optymizmu autora dotyczącego możliwości ich przeniesienia na sieci dwuwymiarowe, ale badania w tym kierunku uważam za bardzo interesujące i pożądane. Praca pana mgr. Badowskiego nie jest więc tylko sprawozdaniem z rozwiązania konkretnego problemu, ale też otwiera nowe pola badań.

Otrzymane przez pana Badowskiego wyniki oceniam bardzo wysoko. Zagadnienia, w których występują nietrywialne oddziaływania międzycząsteczkowe, są zwykle bardzo trudne, a wyniki analityczne niełatwo osiągalne. Podobna sytuacja zachodzi w wypadku niejednorodności sieci, na których zachodzi dyfuzja. Z tego punktu widzenia rezultaty pana mgr. Badowskiego są niezwykle cenne. Nawet jeśli dotyczą modelowego w swym charakterze przypadku jednowymiarowego, stanowią znakomitą bazę do testowania wszelkiego rodzaju podejść przybliżonych i/lub numerycznych.

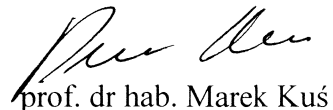
Konstrukcja i układ pracy są bardzo dobre, poszczególne jej części wiążą się ze sobą w logiczną całość, co pozwala prześledzić w szczegółach argumentację autora, choć nieco ekstrawaganckim pomysłem wydał mi się podział stustronicowej pracy na ponad 20 rozdziałów, ale takie rozdrobnienie strukturalne rozprawy nie wpływa istotnie na wspomniane powyżej jej walory. Udało się też autorowi dość dokładnie opisać, co jest jego oryginalnym wkładem w rozwiązanie problemu.

Język pracy pozostawia wiele do życzenia. Nagminne używanie sformułowania „ilość” zamiast „liczba” (*passim*) w stosunku do takich obiektów jak cząstki, wyrażenia algebraiczne, czy elementy ciągów nie powinno mieć miejsca nawet w mowie potocznej, a tym bardziej w pracy naukowej. Słowo „sumacja” (str. 35, 40) nie istnieje w języku polskim, a „aplikacja” może oznaczać albo praktykę w zawodach prawniczych, albo naszyty na tkaninie w celach ozdobnych fragment innego materiału. Żadnego z tych znaczeń nie miał chyba autor na myśli pisząc na str. 96 swojej rozprawy o zawartości rozdziałów 10. i 11. Na str. 35 straszy swoją hybrydyczną, ni to francuską („ensemble”), ni to polską („ansambl”) niejaki „ensambl” (wielki zresztą) i to zupełnie niepotrzebnie, gdyż istnieje znakomity polski wyraz „zespół” powszechnie stosowany w użyтым przez autora kontekście. Wydaje mi się, że sformułowanie „ciąg rozumowy” (str. 13) ustanawia zbyt śmiały związek frazeologiczny (zapewne chodziło o „ciąg rozumowań”). Dowiedziałem się też (str. 36), że „potencjał chemiczny jest rozumiany jako ciśnienie nad układem, poprzez które dopływają do sieci dziury”. Trudno jest mi sobie wyobrazić, że coś „płyne przez ciśnienie”, które w dodatku jest „nad układem”. Prawdopodobnie ciśnienie jest wywierane na układ i powoduje dopływ dziur. Podobną eliptyczność sformułowania, świadczącą raczej o zbytnim pośpiechu w trakcie pisania pracy, niż o wyrafinowaniu stylu, niesie też „przypadek nieoddziałujący” (*ibid.*), a przecież to cząstki oddziałują lub nie, a nie przypadki. Moje podejrzenia autora o predylekcję do stylistycznych wyrzutni zostały zachwiane przez pleonastyczne, nieśmiertelne „potencjalne możliwości” (str. 96). Oczywiście stylistyczne potknięcia nie powodują, że tekst staje się niezrozumiały (wszyscy w końcu rozumieją, że „miejsca siedzące” w tramwaju same nie siedzą, a „potencjalność” możliwości nie oznacza ich niezależności od historii), dlatego jednak autor nie zadbał o to, aby rozprawa była miła w czytaniu?

Dostrzegłem kilka drobnych błędów we wzorach. Tak np. po prawej stronie równania (11) brak kropki oznaczającej pochodną po czasie, a na str. 33 w definicji wielkości p pojawia się niezdefiniowana wielkość J (zamiast wprowadzonej tuż przedtem energii wiązania ε).

Usterki formalne nie umniejszają merytorycznej wagi otrzymanych w rozprawie rezultatów. Przedstawiona mi do oceny praca spełnia wszelkie ustawowe i zwyczajowe kryteria stawiane rozprawom doktorskim i wnoszę o dopuszczenie jej autora do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Warszawa 9.03.2008


prof. dr hab. Marek Kuś