

Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk

Zakład VIII
Zespół 13
dr hab. Wojciech Gózdź, prof. IChF
E-mail: wfg@ichf.edu.pl
Tel. 223433242

ul. Kasprzaka 44/52, 01-224 Warszawa

Tel. +(48 22) 343 32 42
+(48 22) 343 20 00
Fax +(48 22) 343 33 33
+(48 22) 632 52 76
E-mail: ichf@ichf.edu.pl

15.11.2016 Warszawa

Recenzja rozprawy doktorskiej magistra Marcina Mińkowskiego „Dyfuzja cząstek w ośrodkach anizotropowych i jej rola w procesie samoorganizacji warstw krystalicznych”.

Praca została wykonana pod kierunkiem prof. dr hab. Magdaleny Załuskiej-Kotur oraz promotora pomocniczego dr. Filipa Krzyżewskiego w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk. Praca składa się z ośmiu rozdziałów. Dwa pierwsze rozdziały poświęcone są opisowi badanych zjawisk fizycznych oraz metod matematycznych zastosowanych w pracy doktorskiej. W rozdziałach od drugiego do siódmego przedstawiono wyniki obliczeń. W każdym rozdziale opisano wyniki dotyczące różnych układów fizycznych, zaczynając od najprostszych i kolejno przechodząc do coraz bardziej złożonych.

W rozdziale trzecim przedstawiono wyniki obliczeń współczynników dyfuzji atomu Ga na powierzchni GaAs (001) dla dwu rekonstrukcji powierzchni nazywanych alfa i beta. Stosując metodę wariacyjną opisaną w poprzednim rozdziale, otrzymano analityczne wyrażenia na współczynniki dyfuzji. Do obliczeń wykorzystano strukturę energetyczną powierzchni GaAs z uprzednio opublikowanych prac. Zbadano zależność współczynników dyfuzji oraz energii aktywacji od temperatury. Po raz pierwszy obliczenia tego typu zostały wykonane dla powierzchni, dla których struktura energetyczna była dokładnie zbadana.

W rozdziale czwartym zbadano proces dyfuzji atomu i dimeru Cu na powierzchniach Cu(111) i Ag(111). Obliczenie współczynników dyfuzji dla atomu Cu zostały przeprowadzone analogicznie do obliczeń opisanych w poprzednim rozdziale. Obliczenia współczynników dyfuzji dimeru Cu było o wiele bardziej złożone, gdyż należało uwzględnić o wiele więcej konfiguracji zajmowanych przez dimer niż przez pojedynczy atom w węzłach aktywnych na powierzchni Ag i Cu. Ponadto dla dimeru można było obliczyć współczynnik dyfuzji rotacyjnej. Analityczne wzory na współczynniki dyfuzji zostały obliczone metodą wariacyjną. Autor zanalizował zależność temperaturową współczynników dyfuzji, energii aktywacji oraz efektywnych prefaktorów dla dyfuzji atomu i dimeru Cu. Ciekawym wynikiem jest pokazanie, że zwiększając temperaturę można spowodować, że dyfuzja dimery Cu na sieci Ag(111) stanie się szybsza niż dyfuzja na sieci Cu(111), jak było to dla niższych temperatur.

W rozdziale piątym zbadano zjawisko dyfuzji kolektywnej nieoddziałujących cząstek na sieciach anizotropowych. Sieci anizotropowe były tworzone przez deformację sieci kwadratowej lub trójkątnej. Zastosowano metodę wariacyjną do wyprowadzenia analitycznych wzorów na współczynniki dyfuzji podobnie jak było to zrobione dla dyfuzji

pojedynczych cząstek. W oparciu o wyprowadzone wzory przeprowadzono numeryczne obliczenia ewolucji gęstości cząstek dla zadanego stanu początkowego. Otrzymano anizotropowe rozkłady lokalnej gęstości cząstek.

W rozdziale szóstym zbadano kolektywną dyfuzję cząstek oddziałujących. W rozdziale tym metoda wariacyjna została zastosowana do najbardziej złożonego układu modelowego. Model ten powstał poprzez rozszerzenie wcześniej badanego modelu „pasków”. Zastosowano metodę macierzy przejścia do obliczenia sumy statystycznej, co pozwoliło na wyprowadzenie wyrażen na koncentracje składników. Następnie otrzymano analityczne wyrażenia na współczynniki dyfuzji. Autor poddał analizie zależność współczynników dyfuzji od stężenia cząstek. Zbadano również jak współczynniki dyfuzji zależą od kilku przykładowych wariantów oddziaływań między cząstkami. Interesującym wynikiem jest pokazanie, że oddziaływania przyciągające mogą zarówno przyspieszać jak i spowalniać dyfuzję, natomiast oddziaływania odpychające jedynie przyspieszają dyfuzję. Warto również podkreślić to, że badany model może być uogólniony tak aby można było badać jeszcze bardziej złożone układy.

W rozdziale siódmym modelowano matematycznie wzrost dwuskładnikowych kryształów niemieszalnych PbTe/CdTe. Układy takie były badane doświadczalnie. W zależności od temperatury, w której było przeprowadzane doświadczenie otrzymywano różne typy struktur. Wyjaśnienie powstawania tych struktur było motywacją dla autora aby przeprowadzić odpowiednie modelowanie matematyczne tego zjawiska. Autor skonstruował odpowiedni model matematyczny i przeprowadził symulacje metodą Monte Carlo. Przeprowadzone zostały symulacje dla kilku temperatur. Otrzymano kilka różnych typów struktur krystalicznych. Zbadano zmiany struktury w zależności od czasu. Ponadto zbadano rolę dyfuzji objętościowej oraz powierzchniowej w procesie powstawania badanych struktur. Niewątpliwym sukcesem było otrzymanie dużej zgodności między doświadczeniem a symulacjami dla tak złożonych zjawisk fizycznych.

Rozdział ósmy jest zwięzłym podsumowaniem wszystkich otrzymanych wyników.

Spis literatury zawiera 71 odnośników. Wyniki rozprawy doktorskiej zostały opublikowane w bardzo dobrych czasopismach naukowych. We wszystkich pięciu publikacjach mgr Mińkowski jest pierwszym autorem, ponadto w czterech publikacjach jedynym współautorem jest opiekun naukowy prof. Załuska-Kotur.

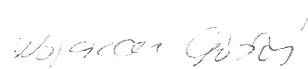
Praca jest napisana starannie, zrozumiale, poszczególne rozdziały układają się w logiczną i spójną całość. W każdym rozdziale, autor jasno przedstawia problem jaki chce rozwiązać oraz podsumowuje wyniki swoich badań. Obliczenia przeprowadzone przez autora są opisane klarownie a wyniki przedstawione systematycznie tworząc logiczną całość.

Tematyka badań jest interesująca zarówno z poznawczego jak i praktycznego punktu widzenia. Problemy naukowe badane w pracy są dobrze zdefiniowane, na ogół są inspirowane przez wcześniej opisane eksperymenty. Metody badawcze są dobrane adekwatnie do badanych zjawisk fizycznych. Autor pokazał jak wszechstronna i użyteczna jest metoda wariacyjna obliczania współczynników dyfuzji. Metoda ta może być stosowana do bardzo złożonych układów fizycznych. Autor zaproponował również możliwość kontynuacji prowadzonych obliczeń przez odpowiednią modyfikację badanego modelu.

W pracy brakuje mi odniesienia się autora do innych badań, na przykład takich w których stosuje się metody symulacji komputerowych. Dobrze byłoby pokazać jak wyniki autora prezentują się na tle wcześniej opublikowanych prac oraz zaznaczyć unikalność i nowatorskość wyników otrzymanych przez autora. Dobrym miejscem do tego byłby rozdział wstępny, który mógłby być bez obawy nawet dużo dłuższy.

Podsumowując stwierdzam, że mgr Mińkowski dobrze opanował podstawową wiedzę dotyczącą dyfuzji na powierzchniach o strukturze krystalicznej oraz metody badawcze takie jak symulacji Monte Carlo. Następnie wykazał umiejętność prawidłowego analizowania wyników i formułowania wniosków. Uzyskane przez niego wyniki są wartościowe i zostały opublikowane w prestiżowych czasopismach. Mgr Marcin Mińkowski w pełni spełnia wymogi odnośnej ustawy i wnoszę o dopuszczenie go do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Uważam, że praca zasługuje na wyróżnienie, gdyż autor wykazał się pomysłowością w wykorzystaniu metody wariacyjnej do zbadania skomplikowanych układów fizycznych, otrzymał interesujące wyniki, które zostały opublikowane w prestiżowych czasopismach naukowych. We wszystkich publikacjach mgr Mińkowski jest pierwszym autorem, co świadczy o jego dużym wkładzie w powstanie tych publikacji. Wnoszę o wyróżnienie pracy doktorskiej mgr. Mińkowskiego.



Wojciech Góźdz