



**POLITECHNIKA  
GDAŃSKA**

WYDZIAŁ FIZYKI TECHNICZNEJ  
I MATEMATYKI STOSOWANEJ

Gdańsk, dn. 31 sierpnia 2016 r.

prof. dr hab. inż. Jarosław Rybicki  
Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej  
Katedra Fizyki Ciała Stałego  
Politechnika Gdańska

Ocena rozprawy doktorskiej mgr inż. Szymona Maćkowiaka

zatytułowanej: „Własności tribologiczne układów cząsteczek w geometrii  
szczeliny w warunkach kontrolowanego ciśnienia  
badane metodą Dynamiki Molekularnej”

Praca doktorska mgr inż. Szymona Maćkowiaka dotyczy zagadnień związanych z modelowaniem zjawisk nanotribologicznych na poziomie atomowym. Są to zagadnienia trudne. Zjawiska nanotribologiczne są niezwykle złożone, w ogólności występuje w nich wiele różnych, zależnych od siebie procesów fizycznych (mechanicznych i elektromagnetycznych) oraz chemicznych (zrywanie wiązań, reakcje chemiczne). Modelowanie metodą cząstek wymaga obliczeń wieloskalowych lub zastosowania metod wieloskalowych (np. hybrydowych, łączących modele kontynualne z atomistycznymi). We wstępie autor rozprawy pisze optymistycznie „W skali molekularnej wiele pytań, dotyczących istoty tarcia, nadal pozostaje otwartych” (str. 11). To bardzo oględne sformułowanie: osobiście mam wrażenie, że zjawiska tribologiczne to dziewicza dżungla, w której udało się w ostatnich kilkunastu latach zaledwie zacząć przecinać pierwsze ścieżki – trudno jest mówić o jakiejś systematycznej penetracji. Nie bez powodu zatem układ rozważany w rozprawie jest skrajnie prosty. Jednocześnie tribologia staje się coraz ważniejszą dziedziną badań, nie tylko ze względów ekonomicznych, w ramach tradycyjnych układów i urządzeń (por. słynny raport Josta), ale jako podstawa rozwoju nowych układów elektromechanicznych o nanometrycznych rozmiarach. Zatem tematyka podjęta w rozprawie jest aktualna i ważna zarówno ze względu na zastosowania w tradycyjnej makroskopowej mechanice

przemysłowej, jak i w nanomechanice przyszłości. Nowoczesne, systematyczne i gruntowne badania nad zjawiskami tarcia, prowadzone na poziomie atomistycznym, są potrzebne i ważne zarówno poznawczo, jak i ekonomicznie. A zaczynać je trzeba od rzetelnej, pełnej i pogłębionej analizy najprostszych układów modelowych. W sferę takich badań wpisują się wyniki przedstawione w rozprawie.

Już wstępne oględziny rozprawy pokazują, że jest ona dobrze napisana, ciekawa i wartościowa. Dokładna lektura w pełni potwierdza to wrażenie.

Redakcja jest bardzo staranna: jednolity (konsekwentny) skład, estetyczne ilustracje z czytelnymi podpisami, logiczny układ rozdziałów o zrównoważonych proporcjach objętości, rozsądne umieszczenie informacji ważnych, ale nie niezbędnych dla zrozumienia toku rozważań, w dwóch dodatkach – wszystko to sprawia, że rozprawę dobrze się czyta, narracja jest wartka, język ładny. Zauważyłem tylko kilka (naście) literówek, błędnych podziałów wyrazów, są też – wbrew regule – jednoliterowe wyrazy na końcach linii. W tytule byłoby właściwsze użycie słowa „właściwości” zamiast „własności”. Ponadto Autor wielokrotnie zestawia bezpośrednio terminy „temperatura”, „ciśnienie” i „ściananie”. Dwa pierwsze z nich to nazwy parametrów fizycznych, trzeci to nazwa procesu. Mamy tu więc pomieszanie (równorzędne zestawienie) dwóch różnych kategorii semantycznych, co jest błędem z semiotycznego punktu widzenia. Usterki te nie zmieniają mojej opinii, że Autor szanuje potencjalnego czytelnika i starając się przedstawić dobrze redakcyjnie przygotowany materiał - ułatwić mu lekturę.

Praca doktorska mgr inż., Szymona Maćkowiaka zajmuje 118 stron, zawiera 44 rysunki i 90 starannie dobranych pozycji literaturowych. Rozprawa składa się ze zwięzłego wstępu ogólnego (Rozdział I), po którym następuje przegląd znanych z literatury modeli tarcia suchego i płynnego (Rozdział II). Zasadniczą część rozprawy stanowią rozdziały III i IV, w których Autor kolejno omawia swoje prace nad rozwinięciem modeli symulacyjnych, przeznaczonych dla konkretnie rozważanego układu oraz opisuje i analizuje uzyskane wyniki. Rozdział V zawiera podsumowanie i wnioski. Pracę dopełniają dwa dodatki, poświęcone kolejno szczegółom metody obliczeniowej oraz obliczeniom teoretycznym, uzasadniające wypowiedziane w poprzednich rozdziałach stwierdzenia. Pracę zamykają: wykaz rysunków, spis publikacji Autora oraz obszerny wykaz literatury.

W rozdziale przeglądowym Autor zwięźle, w układzie chronologicznym przedstawia teorie i modele tarcia, jakie pojawiły się od renesansu (Leonardo da Vinci) do początków XXI wieku. Taki rys historyczny już tradycyjnie pojawia się w niemal identycznym brzmieniu w wielu istniejących i znanych podręcznikach tribologii. Autor

rozprawy wykazuje jednak samodzielność: nie zaczyna - jak wszyscy inni - od przykładów stosowania lubrykantów w starożytności, a modele późniejsze stara się sklasyfikować i uporządkować. W literaturze angielskojęzycznej pojawia się zawsze sformułowanie „Frenkel-Kontorova model”, co potwierdza, że Tatiana Kontorova była kobietą; deklinacja stosowana przez Autora rozprawy czasem przeczy temu faktowi. W przeglądzie brakuje też wzmianki o modelu Krogulskiego tarcia suchego. Brakuje też wzmianki o modelach „energetycznych” tarcia, a w szczególności o modelach Kuznetzova i Kostecy’ego. Ponadto mam pewien niedosyt: dodanie kilku szczegółów, takich jak wyjaśnienie pojęcia „wypadkowy promień krzywizny” z opisie kontaktu herciańskiego, czy dodanie jeszcze kilku rysunków, ilustrujących geometrię kontaktu w poszczególnych modelach, zwiększyłoby objętość rozdziału jedynie o 10-15 procent, niewspółmiernie bardziej zwiększając ładunek informacyjny. Mimo tych usterek rozdział stanowi wartościowy przewodnik po różnorodnych modelach tribologicznych i z pewnością słusznie wskazuje na niezwykle złożoność zjawisk tribologicznych.

W pierwszym z dwóch zasadniczych rozdziałów Autor prezentuje dokładnie konkretny układ fizyczny, mający być przedmiotem rozważań: szczelinę pomiędzy dwiema równoległymi, ruchomymi powierzchniami ciała stałego, wypełnioną płynem. Autor systematycznie omawia i pokonuje trudności w modelowaniu poszczególnych – niezbędnych dla realizacji sensownych i realistycznych obliczeń - aspektów fizycznych, takich jak stabilizacja temperatury, ciśnienia, nadanie ruchu względnego ciał, ograniczających płyn.

W szczególności omówiono możliwe modele budowy ścianek i po wnikliwej analizie zdecydowano się na model, utrzymujący atomy materiału ścian „na miejscu” za pomocą oddziaływań dwucząstkowych o odpowiednio dobranej energii wiązania, przy jednoczesnym zadbanie o zachowane całkowitego pędu. Warunki takie realistycznie odpowiadają możliwej sytuacji fizycznej, a przede wszystkim nie prowadzą do niefizycznych drgań. W dalszej części omówiono i przedyskutowano możliwe schematy kontroli temperatury. W rozprawie zaproponowano oryginalny, zachowujący pęd, wariant „łagodnego” skalowania prędkości oraz ciekawy – ze względu na wprowadzenie niesymetrycznych członów dla pędów cząstek – wariant metody Nose-Hoovera.

Kolejno analizie poddane są sposoby obliczania i stabilizacji ciśnienia. Wyniki testów obliczania ciśnienia metodą MOP wskazały na konieczność stosowania możliwie drobnego kroku całkowania równań ruchu. Osobny podpunkt poświęcono zagadnieniu stabilizacji ciśnienia za pomocą barostatów globalnych i lokalnych, wykazując – przynajmniej dla rozważanej geometrii układu, wyższość barostatowania lokalnego. W dalszej części rozdziału metodologicznego przeanalizowano sposoby nadawania

prędkości względnej ściankom ograniczającym. Na koniec zaprezentowane zostały przyjęte do obliczeń równania ruchu, Wykonanie ich wymagało opracowania oryginalnego kodu symulacyjnego. Zaproponowane i zaimplementowane przez Autora rozprawy metody symulacji tarcia w rozważanej geometrii pozwoliły wykonać obliczenia bardziej realistyczne niż relacjonowanie wcześniej przez innych autorów.

Rozdział czwarty zawiera opis i dyskusję wyników symulacji. Symulacje przeprowadzono dla dwóch rodzajów ścian ograniczających: krystalicznych i amorficznych.

Liczba poszczególnych przebiegów symulacyjnych jest duża - wystarczająco duża, aby umożliwić dokładne zbadanie właściwości fizycznych, a dokładniej - mechanicznych układów, poprzez stworzenie dwuwymiarowych map we współrzędnych ( $v_0$ ,  $PN$ ) (ponad 400 punktów na mapę). Przedmiotem zainteresowania były stany stacjonarne. Ich identyfikacji dokonywano na podstawie oględzin profili prędkości, temperatury, gęstości (w kierunku wertykalnym), współczynnika tarcia oraz chwilowej konfiguracji cząstek.

Bardzo interesujące jest zestawienie map stanów stacjonarnych i współczynników tarcia. Okazuje się, że pewne wartości współczynnika tarcia są charakterystyczne dla niektórych stanów stacjonarnych i mogą tym samym służyć do ich identyfikacji. Mapy wartości parametrów tribologicznych we współrzędnych ( $v_0$ ,  $PN$ ) wyznaczają też obszary, w których słuszne są klasyczne prawa tarcia.

Do najważniejszych wyników, przedstawionych w rozprawie, zaliczyć należy:

- wyjaśnienie drgań ciernych jako skutku cyklicznego topnienia i krystalizacji w warstwach;
- pokazanie, że nieruchomy czop może przyjmować orientacje sprzyjające poślizgowi (wtedy współczynnik tarcia spada do prawie zerowej wartości);
- wskazanie na istnienie korelacji pomiędzy następującymi po sobie stanami stacjonarnymi, czyli zależności rodzaju powstających stanów stacjonarnych od warunków ( $v$ ,  $P$ ), w których układ znajdował się wcześniej;
- wykazanie wpływu chropowatości ścianek na właściwości tribologiczne układu (stany SK-SI i CL zdają się wymagać symetrii translacyjnej w strukturze ścianek; nieuporządkowanie struktury ścianek sprzyja mniej symetrycznym zachowaniom płynu smarującego, widocznym w profilach prędkości i temperatury oraz jako „rozmycie” granic na mapach parametrów tribologicznych;

- zaobserwowanie – prawdopodobnie po raz pierwszy w symulacjach komputerowych – ujemnego różniczkowego współczynnika tarcia.

Podsumowując, w pełni podzielam auto-opinię Autora, zawartą w podsumowaniu rozprawy: „Zestawienie szczegółowych map stanów stacjonarnych z mapami współczynnika i siły tarcia dla układu cząsteczek w geometrii szczeliny w warunkach ( $T$ ,  $v$ ,  $P$ ), ograniczonych ścianami krystalicznymi i amorficznymi stanowi oryginalny wkład do współczesnej wiedzy na temat tarcia” i dalej: „... wykonane symulacje rzucają nowe światło na mechanizmy procesów tribologicznych takich jak drgania cierne, nadśliskość w stanie nieruchomego czopu czy negatywność różniczkowego współczynnika tarcia.”, chociaż nie zgadzam się na sformułowanie „negatywność” – powinna być „ujemność”.

Mgr inż. Szymon Maćkowiak rozwiązał szereg problemów z zakresu technik/metodologii modelowania zjawisk tarcia mokrego, zaimplementował opracowane algorytmy i wykonał solidną serię obliczeń, a ich wyniki starannie krytycznie przedyskutował. Cel pracy został osiągnięty. Pono Jan Sebastian Bach, w okresie lipskim, kiedy to cotygodniowo komponował kantatę na niedzielę, pracował mniej więcej tak: poniedziałek – gromadzenie sił, wtorek – przycięcie papieru, środa – ostrzenie ołówków, czwartek – komponowanie kantaty, piątek – dopisanie głosów i kopiowanie partytury, sobota – próby z orkiestrą i chórem, niedziela – wykonanie kantaty. Pan Maćkowiak podobnie: widać, że najpierw zapoznał się gruntownie z problemem i zebrał siły, potem przyciął papier i naostrzył ołówki (nowe algorytmy i ich testowanie), po czym napisał kantatę (wyniki i analiza) i ją wykonał (zgrabna prezentacja wyników w rozprawie). Jedyna różnica jest taka, że Bach skomponował ponad 200 kantat, ale to inna sprawa.

Moja bardzo pozytywna ocena rozprawy wynika przede wszystkim stąd, że autor wiele uwagi i ciężkiej pracy poświęcił opracowaniu metodologii symulacji – tak, aby wyniki było fizycznie wiarygodne. Opracowanie nowych metod daje podstawę, na której Autor czy czytelnicy rozprawy i związanych z nią publikacji, będą mogli prowadzić własne badania w podobnych układach. Stworzenie narzędzia ma w moim przekonaniu większą wartość niż uzyskanie jakiegoś – nawet spektakularnego – wyniku z wykorzystaniem gotowych kodów komercyjnych czy akademickich. Zupełnie jak w fizyce doświadczalnej, gdzie opracowanie nowej, oryginalnej metody pomiarowej jest bardziej wartościowe niż wykonanie setek pomiarów na zakupionej aparaturze.

Na koniec chciałbym zaznaczyć, że dorobek naukowy doktoranta jest dość bogaty. Mgr inż. Szymon Maćkowiak jest współautorem 8 prac naukowych, w tym co najmniej 5 z listy filadelfijskiej, w czasopismach wysokiej rangi, jak Phys. Rev., Phys. Rev. Letters czy physica status solidi.

W konkluzji oceny, biorąc pod uwagę wysoki poziom, wagę i liczbę wyników, stwierdzam, że przedłożona rozprawa doktorska pana mgr. inż. Szymona Maćkowiaka pt. „Własności tribologiczne układów cząsteczek w geometrii szczeliny w warunkach kontrolowanego ciśnienia badane metodą Dynamiki Molekularnej”, w pełni spełnia wymagania stawiane przez obowiązującą ustawę pracom na stopień doktora i wnoszę o dopuszczenie mgr inż. Szymona Maćkowiaka do dalszego toku przewodu doktorskiego.

Ponadto chciałbym zwrócić się do Wysokiej Rady z prośbą o wyróżnienie rozprawy doktorskiej pana Maćkowiaka. Jako uzasadnienie chciałbym wskazać na ostatni akapit z poprzedniej strony recenzji, mówiący o wysokich walorach metodologicznych, których konsekwencje wykraczają poza konkretny przedmiot rozprawy.

