



Prof. dr hab. Krzysztof W. Wojciechowski  
Kierownik Zakładu Fizyki Komputerowej Układów Złożonych  
i Oddziału Fizyki Miękkiej Materii i Materiałów Funkcyjnych

**Instytut Fizyki Molekularnej  
Polskiej Akademii Nauk**

kww@ifmpan.poznan.pl

ul. M. Smoluchowskiego 17, 60-179 Poznań

---

Poznań, 3 IX 2016 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej Pana mgra inż. Szymona Maćkowiaka  
***Własności tribologiczne układów cząsteczek w geometrii szczeliny***  
***w warunkach kontrolowanego ciśnienia badane metodą Dynamiki Molekularnej***  
wykonanej na Wydziale Fizyki Technicznej Politechniki Poznańskiej  
pod kierunkiem Pana dra hab. Arkadiusza C. Brańki, profesora IFM PAN

Napisana po polsku rozprawa p. mgra inż. Szymona Maćkowiaka dotyczy mikroskopowych mechanizmów zjawiska tarcia, a mówiąc precyzyjnie opisuje badania właściwości tribologicznych układów oddziałujących cząsteczek ograniczonych ruchomymi ścianami w warunkach zewnętrznego obciążenia za pomocą opisaną w rozprawie, nowej metody Nierównowagowej Dynamiki Molekularnej. Jest to zagadnienie ważne i aktualne zarówno z punktu widzenia badań podstawowych, jak i nowoczesnych zastosowań.

Praca, licząca 118 stron, składa się z pięciu rozdziałów oraz dwóch zestawów dodatków. Pierwszy z tych zestawów poświęcony jest metodzie dynamiki molekularnej, a drugi zawiera obliczenia uzupełniające dotyczące symulacji i termostatowania układów ograniczonych przestrzennie. Praca poprzedzona jest streszczeniami w języku polskim i angielskim, podziękowaniami, spisem skrótów i symboli, a także spisem treści. Na końcu pracy zamieszczono liczącą 8 pozycji (w tym ostatnia w przygotowaniu) listę publikacji autora oraz bibliografię zagadnienia, która zawiera 90 pozycji.

Cele, zakres i układ pracy omówione zostały w stanowiącym pierwszy rozdział wstępie, który zawiera także krótkie, ale bardzo zręcznie napisane wprowadzenie do tematyki rozprawy. Autor sygnalizuje tamże główne zagadnienia związane z modelowaniem mikroszczeliny, którymi są (1) budowa jej ścian, (2) metody obliczania i kontroli temperatury oraz ciśnienia w układzie, (3) ścinanie i jego kontrola w układzie, a także (4) problem stanów stacjonarnych i ich związku ze współczynnikiem tarcia.

Rozdział drugi poświęcony jest zjawisku tarcia. Naszkicowane w nim zostały zarówno historyczne jak i współczesne modele tarcia suchego, molekularne modele tarcia i modele tarcia wewnętrznego w płynach. Warto podkreślić, że ten ładnie napisany rozdział może stanowić przydatne wprowadzenie dla studentów i doktorantów, a nawet początkujących badaczy w dziedzinie.

W rozdziale trzecim opisano zaproponowaną przez Doktoranta metodę symulacji tarcia w mikroszczelinie i związane z nią zagadnienia szczegółowe, takie jak – między innymi – termostatowanie i barostatowanie badanego układu, czyli wyznaczenie i kontrolę temperatury i ciśnienia w układzie, a także kontrolę ścinania. Zaproponowana w nim oryginalna metoda symulacji nierównowagową metodą dynamiki molekularnej (NEMD) stanowi eleganckie rozszerzenie intensywnie rozwijanych od początku lat 80. ubiegłego stulecia (a zapoczątkowanych pracami Andersena, która stanowi odnośnik [36], dwiema pracami Parrinella i Rahmana, które stanowią odnośniki [39] i [40] oraz Nosego i Hoovera, które są przez Doktoranta cytowane odpowiednio jako [24] i [25]) metod dynamiki

molekularnej (MD) do symulacji w zespołach *innych* niż mikrokanoniczny. Warto tu wspomnieć, że choć metody dynamiki molekularnej stosowane są w różnych wariantach i od przynajmniej trzech dekad do symulacji układów przy stałej temperaturze  $T$  lub ciśnieniu  $P$ , to ciągle nie opisano w literaturze ścisłego sposobu symulacji MD przy stałym potencjale chemicznym. Jest to ciągle aktualne i ważne wyzwanie dla teoretyków.

Rozdział czwarty przedstawia wyniki badań przeprowadzonych przez Doktoranta. Większość symulacji wykonano dla układów złożonych z  $N=2592$  „atomów” Lennarda-Jonesa z periodycznymi warunkami brzegowymi w płaszczyźnie  $xy$ , podczas gdy w kierunku  $z$  były one (układy) ograniczone modelowymi ściankami. Temperatura wynosiła 120 K. Symulacje prowadzono dla „tablicy” złożonej z 21 wartości  $P$  (od 0 do 2000MPa) i z 21 wartości prędkości ścinania (od 0 do 200 m/s), po „wyrównowagowaniu”, z krokiem  $dt=0,005$  przez 1000 zredukowanych jednostek czasu, czyli 2,5 ns. Badano nie tylko układy ze ścianami krystalicznymi, ale i ze ścianami amorficznymi. Otrzymano ciekawe mapy: stanów stacjonarnych (stany: L – ciekły SK-SL – drgań ciernych, PS – nieruchomego czopu, CL – lokalizacji centralnej oraz TR – obszar przejściowy) i współczynnika tarcia (rys.4.2, 4.11 i 4.14) i siły tarcia (rys.4.10 i 4.16). Eleganckie ilustracje mikroskopowych stanów układu przedstawionych na rysunkach 4.3-4.9, 4.12, 4.15 umożliwiają znalezienie związków pomiędzy strukturami mikroskopowymi układu a tarcie. Pokazano związek pomiędzy mapą stanów stacjonarnych i mapą współczynnika tarcia. Znaleziono obszar, w którym tzw. *różniczkowy współczynnik tarcia*, czyli pochodna siły tarcia względem siły nacisku, jest ujemny. Obserwowano też zależność współczynnika tarcia od historii układu, co może pozwolić na znalezienie optymalnych ścieżek zapewniających pożądany (np. najmniejszy lub największy) współczynnik tarcia.

Rozdział piąty i ostatni zawiera podsumowanie i wnioski. Na szczególną uwagę zasługuje – moim zdaniem – wniosek, że otrzymane mapy współczynnika i siły tarcia świadczą o istnieniu ścieżek optymalnego tarcia w procesach opartych na kontroli ciśnienia i prędkości ścinania.

Praca, poza drobnymi potknięciami wypunktowanymi poniżej, jest napisana jasno i precyzyjnie – należy do najlepiej napisanych prac doktorskich jakie czytałem. Z obowiązku recenzenckiego wypunktowałem poniżej zauważone w pracy usterki. Zazaczyłem też problemy, które – moim zdaniem – warto było przedstawić szerzej.

- Zacznę od pytania w odniesieniu do zamieszczonego na stronie 14 zdania „W rozprawie opracowano odpowiednie modyfikacje termostatu Nos’ego-Hoovera [24, 25] i skalowania prędkości [35], umożliwiające kontrolę temperatury w szczelinie.” Mianowicie, pamiętając o brzytwie Ockhama, uważny czytelnik powinien zapytać: *Po co* termostat NH, jeżeli skalowanie prędkości *działa*, a nie badamy właściwości (nierealistycznych już przecież, bo b. cienkich!) ścianek?
- Na stronie 25 zamiast „Model Frenkla-Kontorowa” powinno być napisane „Model Frenkla-Kontorowej”.
- Nie jest oczywiste zdanie na stronie 28: „Zgodnie z wnioskami Petravica, aby uzyskać w układzie nieznikający w czasie współczynnik tarcia, konieczna jest obecność co najmniej dwóch nieskończenie dużych mas we względnym ruchu.” Załóżmy, że jedna z mas jest jednak skończona, ale działa na nią siła. Wtedy *skończony* pęd tej masy *nie ulegnie* rozproszeniu, a wydzielane ciepło będzie pochłaniane przez termostat! Sugeruje to, że przedstawiona tamże argumentacja nie jest poprawna lub wymaga uzupełnienia.
- Mam pytania do równań (3.2) i (3.3) na stronie 32: A co będzie, jeżeli zastosujemy *dodatkowe* więzy (np. zachowanie pędu w części A i w części C), które wymuszają równość zamiast ostatniej nierówności, czyli zachowanie pędu?

- Mam też pytanie do zamieszczonych na stronach 32-33 zdań „W związku z powyższym, zastosowano budowę ścian bez sprężyn, opartą na oddziaływaniach dwucząsteczkowych oraz warunku zachowania całkowitego pędu. [...] Takie rozwiązanie zapewnia realistyczną dynamikę zderzeń molekuł układu ze ścianami.”. Dlaczego Doktorant nie wspomina wcale kwestii momentu pędu?
- Nie jest jasne, dlaczego na rys. 3.4 Doktorant zaprezentował sprężynki łączące cząsteczki "ścian" z niezdefiniowanymi punktami (wirtualnymi węzłami sieci?), jeśli wcześniej ten wariant "ścian" został odrzucony?
- Na stronie 35, w ostatnim zdaniu sekcji 3.2.1 czytamy: „W ten sposób pęd całości jest zachowany.”. Brakuje mi tam wskazówki, gdzie jest to pokazane.
- W kontekście definicji energii kinetycznej warto zastanowić się *głębiej* nad pytaniem, dlaczego w trzecim z równań (3.6) w pierwszym składniku są różne czynniki (prędkość w układzie zadanim i w układzie średniego pędu w ścianie A)? Wszakże prędkość w energii kinetycznej liczona jest zwykle względem *jednego* (konkretnego) układu współrzędnych, a nie w dwóch układach współrzędnych. Dotyczy to też równania(3.8).
- Czy pisząc (w opisie rys. 3.5), że „Tylko oddziaływania dwucząsteczkowe (oznaczone jako ciągłe strzałki) wnoszą wkład do części potencjalnej  $P^U_{zz}$  i tylko cząsteczki, które przekraczają płaszczyznę w danym kroku  $dt$  wnoszą wkład do części kinetycznej  $P^K_{zz}$ .” Doktorant sugeruje, że układy, które opisać można za pomocą *wyłącznie* oddziaływań trójkowych muszą mieć ciśnienie równe zeru?
- Na stronie 49 czytamy, że „W porównaniu do barostatów globalnych, kontrola ciśnienia za pomocą schematu mikroskopowego ma następujące zalety [...]”. Widzimy *względne* zalety schematu i "L-sprawdzenie". Ale czy wyliczono i porównano *ciśnienia* makroskopowe?
- Na rysunku 3.16 brakuje wartości opisujących poziomice. Można je było zaznaczyć np. strzałkami przy skali szarości.
- Na stronie 60 czytamy „Symulacje przeprowadzono w ponad 400 punktach...”. Nie wiemy, czy siatka tych punktów była jednorodna, a jeśli tak, to w jakiej skali.
- Na stronie 69 czytamy, że „Ruch ścian po powierzchni czopu odbywa się wzdłuż kierunków łatwego poślizgu.” Brak informacji jakie to kierunki.
- Na stronie 69 czytamy, że „przesuwane są po sobie dwie suche powierzchnie atomowe o niewspółmiernych stałych sieciowych.”. Szkoda, że tak zdawkowo potraktowano ten problem.
- Na stronie 70 czytamy „Mapa tarcia wskazuje również, że w układzie nie jest spełnione prawo Coulomba, chociaż można wyróżnić fragmenty w obszarach L i CL, gdzie ta zależność jest nieznaczna lub ma charakter liniowy.” Nie jest jasne *jaka* zależność jest „nieznaczna”.
- Niezrozumiały jest przeskok do nowej linii na stronie 71 (linie 7 i 6 od dołu strony).
- Na stronie 101 przy równaniu (B.17) pojawia się to samo pytanie, co przy równaniu (3.2).
- Na stronie 102 czytamy, że „Niezachowanie pędu całkowitego daje w konsekwencji niezachowanie stałej prędkości środka masy, tzn. nie można znaleźć układu odniesienia, w którym układ byłby nieruchomy.” Brakuje tu informacji, że chodzi o układ inercjalny.

- We wzorze (B.22), po skopiowaniu linii 3 ze wzoru (B.20) Doktorant zapomniał dokonać zamiany A -> C, przez co wzór nie jest poprawny, a w dodatku wyrażenie w drugim nawiasie w linii poniżej tego wzoru nie występuje w tym wzorze.
- We wzorze (B.23), podobnie jak we wzorze (B.22), zapomniano zamienić A->C w składnikach od 5 do 2 od końca.
- Na stronie 105 czytamy: „Postulując funkcje rozkładu dla rozważanego układu, ...”. W tym miejscu Doktorant zaniedbuje fakt, że aby uzyskać wniosek końcowy przedstawiony w tym paragrafie trzeba *wykazać*, że  $\rho$  jest funkcją rozkładu, a nie tylko to założyć!
- Zdarzyły się też błędy stylistyczne („Negatywna wartość różniczkowego współczynnika...” zamiast „Ujemna ...” na stronie 70) gramatyczne („Naturalnym pytaniem, które pojawia się w odniesieniu do nowej metody, dotyczy doboru”) i literówki (np. „na przykładzie Argonu” w przedostatnim zdaniu na stronie 39, czy „nadśliskość” w ostatnim zdaniu na stronie 83). Jednak było ich niewiele.

Powyższe uwagi dotyczą drobnych niedoskonałości *znakomitej* rozprawy doktorskiej p. mgra inż. Szymona Maćkowiaka. Niedoskonałości te nie obniżają w sposób znaczący wartości rozprawy, za której trzy główne osiągnięcia uważam:

- opracowanie nowego schematu nierównowagowej dynamiki molekularnej w geometrii szczeliny, w warunkach stałej temperatury  $T$ , określonej prędkości ścinania  $v$  i zadanym ciśnieniu  $P$ ,
- uzyskanie map stanów stacjonarnych dla badanych prędkości ścinania i sił nacisku, a także związków pomiędzy tymi stanami i strukturami mikroskopowymi badanych układów,
- obserwację, że współczynnik tarcia w układzie ze ścianami amorficznymi ma średnio mniejszą wartość w badanym zakresie prędkości ścinania i siły nacisku niż w układzie ze ścianami krystalicznymi.

Są to wyniki bardzo ważne i ciekawe. Jestem też przekonany, że opisana w pracy doktorskiej nowa metoda symulacji będzie rozwijana i stosowana nie tylko przez Doktoranta i współpracowników, ale także przez innych badaczy zarówno w Polsce jak i zagranicą.

Ponieważ wnioskuję o wyróżnienie pracy doktorskiej, więc dodam na zakończenie kilka słów o Doktorancie. Jak wynika z zestawienia publikacji zamieszczonego na stronie 114 doktoratu, jest on współautorem jednej pracy opublikowanej w Physical Review Letters i dwóch prac opublikowanych w Physical Review E. Co więcej, przynajmniej jedna praca związana z doktoratem (numer 8 na tej liście) zostanie wkrótce opublikowana w czasopiśmie o zasięgu światowym. Wykonane przeze mnie poszukiwania w bazie ISI Thomson-Reuters pokazały, że Doktorant jest współautorem przynajmniej 5. prac indeksowanych w tejże bazie, które były cytowane 38 razy (bez autocytowań). Biorąc pod uwagę wiek Doktoranta, jest to wynik bardzo dobry. Warto też dodać, że już w roku 2013 p. mgr inż. Szymon Maćkowiak prezentował swoją pracę na międzynarodowej konferencji 5th World Tribology Congress. Słyszałem seminaria wygłaszane przez Doktoranta. Dowodzą one nie tylko jego dużej wiedzy, ale i umiejętności przedstawiania trudnych zagadnień w sposób prosty i elegancki.

Podsumowując stwierdzam, że przedstawiona mi do oceny rozprawa spełnia ze znacznym nadmiarem wymogi odpowiedniej Ustawy i wnoszę o dopuszczenie jej Autora do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Wnoszę także o wyróżnienie rozprawy.

