

**Recenzja rozprawy doktorskiej Pana mgr Zbigniewa Wojtkowiaka
p.t. „Badanie uporządkowania w obszarze faz mieszanych oraz weryfikacja
nieuniwersalnego zachowania w trójwymiarowym modelu Ashkina-Tellera”**

Informacje ogólne na temat rozprawy

W tej rozprawie, której promotorem jest prof. UAM dr hab. Grzegorz Musiał, przedstawiono pogłębioną analizę najmniej dotąd poznanych fragmentów diagramu fazowego trójwymiarowego modelu Ashkina-Tellera (AT). Chodzi tu głównie o obszar występowania faz mieszanych oraz niektóre linie rozdziału faz i zlokalizowanych na nich pewnych charakterystycznych punktów, których zarówno natura jak i położenie nie były do tej pory wystarczająco precyzyjnie określone. Analizę tę przeprowadzono numerycznie za pomocą symulacji Monte Carlo posługując się przy tym odpowiednio zaadaptowanymi przez Autora metodami obliczania różnego rodzaju kumulant oraz za pomocą histogramów rozkładu energii. Wprawdzie tematyka tych badań nie jest zbyt obszerna, ponieważ obejmuje jedynie niektóre fragmenty diagramu fazowego modelu AT w układach trójwymiarowych, ale przeprowadzone badania są solidne i wiarygodne, podczas gdy dotychczasowe wyniki dotyczące tych obszarów budziły kontrowersje.

W skład rozprawy wchodzi 4 publikacje oraz ich opis liczący w sumie 40 stron.

Współautorem tych publikacji jest prof. Musiał, przy czym w każdej z nich pierwszym autorem jest mgr Wojtkowiak, którego w dalszej części tej recenzji nazywam Autorem.

Ocena wraz z uzasadnieniem, czy rozprawa doktorska prezentuje ogólną wiedzę teoretyczną osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora nauk fizycznych

Na podstawie informacji zawartych w publikacjach stanowiących tę rozprawę, a przede wszystkim w samym opisie rozprawy wnioskuję, że Autor posiada ogólną wiedzę teoretyczną w zakresie fizyki badanych przez siebie zjawisk. Chodzi tu przede wszystkim o znajomość teorii magnetyzmu oraz teorii przejść fazowych i zjawisk krytycznych, którą Autor wykazał się prezentując dość obszernie cały kontekst przeprowadzonych badań. W szczególności jasno przedstawił dotychczasowy stan wiedzy na temat diagramu fazowego modelu AT w układach trójwymiarowych, uwypuklając przy tym trudności z uzyskaniem wiarygodnego opisu niektórych jego obszarów, zwłaszcza obszaru występowania faz mieszanych i linii ograniczających ten obszar.

Jak wynika z treści rozprawy, te trudności z opisem faz mieszanych zostały przez Autora rozwiązane dzięki zastosowaniu zaproponowanej przez niego (rozumiem, że wspólnie z

Promotorem) nowej, oryginalnej metody obliczeniowej, która pozwala na precyzyjne badanie układów, w których występują duże fluktuacje parametru porządku.

O dobrej znajomości podstaw teoretycznych Autora świadczy też to, że swobodnie i ze zrozumieniem opisuje on poszczególne obszary, linie i punkty charakterystyczne na diagramie fazowym, takie jak m.in. jak obszary współistnienia faz uporządkowanych i nieuporządkowanych ze względu na różne stopnie swobody, linie przemiany typu *crossover*, linie przejść fazowych ciągłych i nieciągłych, punkty multi-krytyczne, punkt bifurkacji. Trzeba bowiem przyznać, że już samo rozszyfrowanie tak skomplikowanego diagramu fazowego, jakim on jest w przypadku modelu AT w 3D, a tym bardziej jego udokładnienie, wymaga dobrego opanowania i zrozumienia teorii procesów zachodzących w badanym układzie.

Uwagi dodatkowe i pytania

Trochę zabrakło mi w opisie tej rozprawy nawiązania do wyników uzyskanych metodami nienumerycznymi, takimi jak np. rozwinięcie wysoko- i niskotemperaturowe, metoda grupy renormalizacyjnej. Czy obecnie model AT w 3D badany jest jedynie metodami numerycznymi? A jeśli tak, to na jakie ograniczenia napotkały w tych badaniach metody analityczne?

Ocena wraz z uzasadnieniem, czy rozprawa doktorska wykazuje umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej przez jej autora

Po zapoznaniu się z tą rozprawą uważam, że mgr Zbigniew Wojtkowiak potrafi prowadzić pracę naukową samodzielnie. Świadczy o tym m.in. sposób jego podejścia do problemów związanych z wyznaczeniem najmniej dotąd poznanych obszarów diagramu fazowego modelu AT, w którym współistnieją sprzężenia ferro- i antyferromagnetyczne. Otóż najpierw przeprowadził on głęboką analizę dotychczasowych wyników i na jej podstawie wywnioskował, że wcześniej stosowane metody symulacji komputerowych nie pozwalają na jednoznaczne i precyzyjne określenie stanu układu w fazie mieszanej. Po rozpoznaniu w czym tkwi problem i poszukiwaniach sposobów jego rozwiązania w literaturze naukowej, Autor zaproponował nową, oryginalną metodę umożliwiającą opis faz, w których występują duże fluktuacje parametru porządku. Następnie wyznaczył te fragmenty diagramu fazowego, które głównie z powodu występowania tych dużych fluktuacji nie były do tej pory jednoznacznie określone. A na koniec przedstawił uzyskane wyniki w postaci zarówno artykułów w recenzowanych czasopismach naukowych jak i w opisie rozprawy. To wszystko świadczy też o głębokim zrozumieniu przez Autora zachodzących zjawisk w badanym układzie.

Uwagi dodatkowe

W opisie rozprawy jest sporo nieprecyzyjnych określeń, takich jak np. „perfekcyjne przyśpieszenie” (str.18), „należy ... strategię jego oszacowania (błędu systematycznego) ewaluować” (str. 19), „słabych przemian fazowych” i „silnych przemian fazowych” (str. 25), „w obrębie poszczególnych stopni swobody i całego hamiltonianu” (str. 26), „Korzystając z bibliograficznych metod porównywania algorytmów” (str. 29), „wystarczy mniej niż aktualizacja całej sieci” (str. 29).

Albo zdanie: „Praca R1 demonstruje także dynamiczne zachowanie krytyczne nowego algorytmu klastrowego typu Wolffa.” (str. 27), z którego wynika, że obiektem, w którym występuje dynamiczne zachowanie krytyczne jest nowy algorytm klastrowy typu Wolffa, a nie badany układ.

Ocena wraz z uzasadnieniem, czy rozprawa doktorska stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego

Zdecydowanie tak, jako że zaproponowano w niej m.in. nowe sposoby identyfikacji niektórych faz i wyznaczania obszarów ich występowania na diagramie fazowym, a także zbadano i opisano te fragmenty diagramu modelu, które przedtem nie były dokładnie określone. W szczególności Autor zaproponował i zweryfikował nowe oryginalne podejście do badania obszaru występowania faz mieszanych, w którym uporał się z problemem związanym z dużymi oscylacjami wielkości termodynamicznych, obecnymi w obliczeniach wykonywanych metodami stosowanymi dotychczas. Podejście to opiera się m.in. na skonstruowanym i przetestowanym algorytmie klastrowym bazującym na idei Jula Wolffa, co zostało przedstawione w pracy R1, oraz na przedstawionej w pracach R3 i R4 bardzo ciekawej koncepcji podziału układu na dwie podsieci (uporządkowaną i nieuporządkowaną). Dzięki zastosowaniu wspomnianych tu nowych metod udało się Autorowi wykazać istnienie tzw. efektu *crossover* wzdłuż całej linii łączącej punkty trójkrytyczne A i H, gdzie wcześniejsze wyniki wskazywały na istnienie ciągłych przemian fazowych z możliwością nieuniwersalnego zachowania, w którym wykładniki krytyczne zmieniają się w sposób ciągły. Ponadto Autor wykazał też istnienie rzadko spotykanego współistnienia ciągłych i nieciągłych przemian fazowych wzdłuż tej samej granicy faz HH' dla różnych parametrów porządku i określił z dużą dokładnością położenie punktów trójkrytycznych K i K', a także znalezione przez niego punktu bifurkacji K_b .

Cennym osiągnięciem było też wykazanie, że najbardziej efektywną strategią otrzymywania diagramu fazowego jest wykorzystanie algorytmu klastrowego w regionie krytycznym, natomiast poza tym obszarem algorytmu Metropolisa.

Uwaga dodatkowa

Trudno jest mi zaakceptować wielokrotnie używane przez Autora stwierdzenie, że w eksperymentach komputerowych wykonuje on pomiary, np. ciepła właściwego. Według mnie są to obliczenia numeryczne - nie pomiary, gdyż dotyczą modelu teoretycznego, a nie realnego układu fizycznego.

Podsumowując, oceniam pozytywnie wszystkie aspekty tej rozprawy, które zgodnie z zaleceniami Rady Doskonałości Naukowej podlegają ocenie recenzenta i stwierdzam, że rozprawa doktorska mgr. Zbigniewa Wojtkowiaka spełnia wszystkie wymagania ustawy z dnia 20 lipca 2018 r., Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce. W związku z tym wnioskuję o dopuszczenie mgr. Zbigniewa Wojtkowiaka do publicznej obrony pracy doktorskiej.

R. Leśniński