

Zbigniew Jacyna-Onyszkiewicz
profesor senior na Wydziale Fizyki
Uniwersytetu im. A. Mickiewicza
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 2
61-614 Poznań

Poznań, dnia 19 stycznia 2022 r.

Recenzja
pracy doktorskiej mgr Doroty Jeziorek-Knioła
pt. „Zbadanie nieciągłych przemian fazowych w złożonych
spinowych układach sieciowych przy pomocy eksperymentów
komputerowych: trójwymiarowy model Ashkina-Tellera”

Przedstawiona do recenzji praca Doroty Jeziorek-Knioła, której promotorem jest pan prof. UAM dr hab. Grzegorz Musiał, została wykonana w Zakładzie Fizyki Materiałów Funkcjonalnych Wydziału Fizyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Dotyczy ona aktualnego zagadnienia badania metodami symulacji komputerowych nieciągłych przemian fazowych w modelu Ashkina-Tellera, który jest nietrywialnym uogólnieniem modelu Isinga. Model Ashkina-Tellera znajduje wciąż zastosowania do modelowania interesujących zjawisk metodami mechaniki statystycznej. Symulacje komputerowe wypełniają lukę pomiędzy teorią i eksperymentem. W wielu wypadkach skomplikowany i kosztowny eksperyment może być zastąpiony symulacją oraz wtedy, gdy metody analityczne nie pozwalają na badanie takich układów ze względu na ich dużą złożoność.

Praca doktorska (licząca 86 stron) zawiera: wstęp, sześć rozdziałów, podsumowanie oraz bibliografię obejmującą 61 pozycji. Główne wyniki pracy zostały przedstawione w postaci graficznej na 40 rysunkach oraz w sześciu tabelach.

Mgr Dorota Jeziorek-Knioła opublikowała do tej pory 1 pracę samodzielną i 7 prac współautorskich, z których jedną w Phys. Rev. E w 2021 roku. Rozpoczęła ona studia doktoranckie w 2005 roku, a otwarcie przewodu doktorskiego nastąpiło 24 lipca 2007 roku. Wydłużony okres wykonywania pracy doktorskiej związany był przede wszystkim z tym, że pani Dorota Jeziorek-Knioła jest czynnym nauczycielem fizyki. Jako nauczyciel fizyki pracowała najpierw w szkole w Pleszewie a obecnie w III Liceum Ogólnokształcącym w Kaliszu.

We wstępie pracy doktorskiej autorka przedstawiła główny cel rozprawy oraz zasadnicze metody badawcze w niej zastosowane. Głównym celem doktoratu było zbadanie nieciągłych przemian fazowych trójwymiarowego, symetrycznego modelu Ashkina-Tellera, występujących na bogatym diagramie fazowym określonym na płaszczyźnie dwóch stałych – stałej sprężenia dwuspinowego i stałej sprężenia czterospinowego.

Trzy pierwsze rozdziały pracy doktorskiej mają charakter wstępny i zawierają wiadomości podręcznikowe. Rozdział 1 zawiera wprowadzenie do termodynamiki statystycznej przemian fazowych i ich klasyfikacji.

W krótkim rozdziale 2 przedstawiono pięć modeli spinowych: model Isinga,

model Heisenberga, model XY, model Potts'a i model Ashkina-Tellera. który w wersji symetrycznej jest głównym obiektem badań autorki. W rozdziale tym przedstawiono także zastosowanie modeli spinowych do opisu gazu sieciowego i stopu wieloskładnikowego. W niedużym rozdziale 3 autorka omówiła zasadnicze właściwości magnetyczne układów makroskopowych.

W rozdziale 4 przedstawiono metodę Monte Carlo, którą jak wiadomo można podzielić na dwa etapy. W pierwszym etapie doprowadza się układ do stanu równowagi termodynamicznej, charakteryzującego się minimalną energią swobodną. W drugim etapie wyznacza się interesujące nas średnie termodynamiczne. Podczas zbliżania się układu do stanu równowagi termodynamicznej może pojawić się trudność, polegająca na występowaniu stanów metastabilnych, sugerująca, że układ osiągnął już stan równowagi termodynamicznej. W drugim etapie metody Monte Carlo korzystając z ergodyczności układu przy założeniu, że proces symulacji jest łańcuchem Markowa, wyznaczamy średnie po zespole statystycznym.

W podrozdziale 4.1 autorka przedstawiła algorytm procesu Markowa losowania stanów układu zaproponowany przez Metropolis'a i jego współpracowników oraz algorytm Swendsena-Wanga i algorytm Wolfa.

W podrozdziale 4.2 została pokazana metoda uzyskania wstępnej lokalizacji punktów przemian fazowych dla ustalonej wartości stałej sprzężenia czterospinowego. W tym celu wykorzystano badania kumulantów Bindera, zaadaptowanych przez G. Musiała, L. Dębskiego i G. Kamieniarza dla trójwymiarowego modelu Ashkina-Tellera, jako funkcji rozmiaru L układu, mającego kształt sześciangu.

Następnie, w podrozdziale 4.3 wykorzystano kumulanty M. S. S. Challi (4.3.1) zmodyfikowane przez G. Musiała do rozróżnienia pomiędzy ciągłą i nieciągłą przemianą fazową w układzie z wieloma niezależnymi parametrami porządku wykazującymi niezależne uporządkowania. Ze wzoru (4.3.2) na minimum tej kumulanty w granicy termodynamicznej, przy założeniu, że nieciągła przemiana fazowa jest słaba, autorka wyznaczyła ciepło przemiany i lepsze oszacowanie krytycznej wartości stałej sprzężenia dwuspinowego przy ustalonej wartości stałej sprzężenia czterospinowego.

Wzór (4.3.3), z którego doktorantka określiła minima kumulant Challi został natomiast wyprowadzony przez J. Lee i J. M. Kosterlitz'a przy założeniu, że nieciągła przemiana fazowa jest silna. Ci sami autorzy do badania nieciągłych przemian fazowych, oprócz kumulanty Challi, zaproponowali kumulanty określone w podrozdziale 4.4 wzorem (4.4.1) oraz podali wyrażenie (4.4.2), określające ich maksima w granicy termodynamicznej.

W podrozdziale 4.5 autorka przedstawiła wykorzystanie histogramu rozkładu energii E , czyli funkcji $P(E)$, gdzie P to prawdopodobieństwo, w symulacjach typu Monte Carlo dla temperaturowych nieciągłych przemian fazowych w układach trójwymiarowych z założonymi periodycznymi warunkami brzegowymi. Doktorantka w pracy współautorskiej otrzymała dla modelu Ashkina-Tellera charakterystyczny histogram $P(E)$ o dwóch pikach w obszarze krytycznym. Przykład uzyskanego histogramu został przedstawiony na rysunku 4.5.1. Przeprowadzona dyskusja umożliwiła uzyskanie wyrażenia (4.5.4) określającego ciepło nieciągłej przemiany fazowej.

Podrozdział 4.6 poświęcony został omówieniu zagadnienia przetwarzania równoległego, które było wykorzystywane w pracy doktorskiej.

W rozdziale 5 autorka przedstawiła uzyskane wyniki dla trójwymiarowego modelu Ashkina-Tellera. Dotyczyły one badań nieciągłych przemian fazowych wzdłuż linii AP(Fb)F oraz (Fb)G diagramu fazowego określonego na płaszczyźnie dwóch stałych: stałej sprzężenia dwuspinowego i stałej sprzężenia czterospinowego, gdzie A, F i G są punktami trójkrytycznymi, P to tak zwany punkt Potts'a oraz (Fb) to punkt bifurkacji.

Przedstawione wyniki badań zostały otrzymane dzięki rozbudowanym przez doktorantkę symulacjom komputerowym, przeprowadzonym przede wszystkim na platformach obliczeniowych Poznańskiego Centrum Superkomputerowo-Sieciowym. Jednak obliczenia testowe wykonywane były na multikomputerze Zakładu Fizyki Materiałów Funkcjonalnych UAM (przed rokiem 2020 był to Zakład Fizyki Komputerowej) oraz na multikomputerze dużej mocy „cluster0” Wydziału Fizyki UAM. Symulacje te posłużyły przede wszystkim do wyznaczenia ciepła nieciągłej przemiany fazowej wzdłuż wymienionej wcześniej linii.

Równowagowe konfiguracje układów branych w kształcie sześciangu o boku L z zakresu od 16 do 32 stałych sieci, były generowane przy użyciu algorytmu Metropolisa oraz generatorów liczb pseudolosowych. Na układ nałożono periodyczne warunki brzegowe. W celu doprowadzenia układu do stanu równowagi termodynamicznej zastosowano „wygrzewanie” o długości od stu tysięcy do miliona kroków Monte Carlo. Należy podkreślić, że jeden eksperyment komputerowy Monte Carlo trwał od 20 godzin dla najmniejszych L do kilku miesięcy – dla największych L, przy zastosowaniu przetwarzania równoległego, opisanego w podrozdziale 4.6.

Podrozdział 5.1 poświęcony został wyznaczeniu wstępnych lokalizacji, zależnych od temperatury punktów nieciągłej przemiany fazowej wzdłuż linii AP(Fb)F oraz (Fb)G przy ustalonej wartości stałej sprzężenia czterospinowego, przy pomocy kumulant Bindera Q, które są zdefiniowane wyrażeniem (4.2.3).

W podrozdziale 5.2 doktorantka przedstawiła skrupulatną analizę zachowań uogólnionych kumulant typu Challi V określonych wzorem (4.3.1), niezależnie dla każdego parametru porządku $\langle \alpha \rangle$, gdzie $\alpha = s, \sigma, \sigma$ oraz dla całego układu. W tabeli 5.2.2 zestawiono wartości ciepła przemiany dla poszczególnych parametrów porządku oraz dla całego hamiltonianu.

Z kolei, w podrozdziale 5.3 autorka obliczyła wartości kumulant Lee-Kosterlitz'a U dla poszczególnych parametrów porządku $\langle \alpha \rangle$ określonych wzorem (4.4.1). Analogicznie, jak w podrozdziale 5.2 dla kumulant Challi V, doktorantka wykreśliła zależność U od stałej sprzężenia dwuspinowego dla różnych wartości L (rysunki 5.3.1 i 5.3.2). Porównanie wyników ekstrapolacji do granicy termodynamicznej odciętych minimów kumulant V i maksimów kumulant U przedstawiono na rys. 5.3.4. Wyniki lokalizacji punktów przemian fazowych tymi dwiema metodami dają wartości krytyczne stałej sprzężenia dwuspinowego różniące się na piątym miejscu po przecinku.

W podrozdziale 5.4 doktorantka przeprowadziła analizę histogramu rozkładu energii. Hamiltonian trójwymiarowego modelu Ashkina-Tellera (2.4.1) jest sumą trzech członów, z których każdy przedstawia energię oddziaływania w zakresie

jednego parametru porządku: $\langle s \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ i $\langle s\sigma \rangle$. Dlatego wykorzystywane są średnie temperaturowe energii poszczególnych członów hamiltonianu oraz średnia temperaturowa całego hamiltonianu. Umożliwiło to doktorance obliczenie ciepła nieciągłej przemiany fazowej. W tabelach 5.5.1 i 5.5.2 zestawiono wartości ciepła nieciągłej przemiany fazowej uzyskane przy pomocy kumulant V i U oraz z analizy minimów $-\ln P(E)$ dla dwóch wartości stałej sprzężenia czterospinowego: 0,1 i 0,18. Widać dobrą zgodność wartości ciepła przemiany uzyskanych tymi różnymi metodami.

Istotnym wynikiem, przedstawionym na rysunku 5.4.5 jest pokazanie, że w model Ashkina-Tellera w punkcie Potts'a wykazuje największe ciepło nieciągłej przemiany fazowej a punkt $F(b)$ nie jest punktem trójkrytycznym dla parametru porządku $\langle s\sigma \rangle$.

Autorka, podsumowując swoje wyniki w podrozdziale 5.4 stwierdza, że wiarygodność ich podnosi fakt pełnej zgodności z wynikami otrzymanymi z użyciem algorytmu klasterowego typu Wolfa opracowanego dla modelu Ashkina-Tellera przez Wojtkowiaka i Musiała. Ta wiarygodność jest istotna, ponieważ w omawianym modelu są obecne stany metastabilne i niestabilne, które mogą być problemem dla algorytmu Metropolisa, generującego nowe konfiguracje równowagowe przez odwracanie pojedynczych spinów.

Rozdział 6 ma inny charakter, niż rozdziały poprzednie i jest związany z faktem, że pani mgr Dorota Jeziorek-Knioła to czynny nauczyciel fizyki. W rozdziale tym przedstawiono bowiem symulacje komputerową dla płaskiego modelu Isinga, która może mieć zastosowanie w nauczaniu fizyki. W tym celu stworzono aplikację nazwaną „Ciągłe przemiany fazowe”, umożliwiającą wizualizację mikroskopowego zachowania się układu fizycznego w obszarze ciągłej przemiany fazowej typu porządek- nieporządek.

Z obowiązku recenzenta przytaczam niektóre nieścisłości i pomyłki, których nie uniknęła autorka pracy doktorskiej takie jak na przykład: błędy we wzorach (1.3.1), (1.3.2) i (1.3.7), brak konsekwencji w nazywaniu nieciągłych przemian fazowych, brak w kilku miejscach przecinków lub kropek, nie jasny zapis stron w 8 pozycji bibliograficznej na str. 83.

Drobne niedoskonałości, nie umniejszają oczywiście naukowej wartości pracy, która jest kompletna, napisana jasno i poprawnie pod względem merytorycznym oraz zawiera dobrej jakości rysunki.

W podsumowaniu uważam, że recenzowana rozprawa doktorska dotyczy aktualnych zagadnień nieciągłych przemian fazowych w modelu Ashkina-Tellera. Zawiera wartościowe i nowe rezultaty badawcze oraz ich wyczerpującą dyskusję. Cenne jest to, że autorka określa wkład merytoryczny do swojej pracy doktorskiej pozostałych członków zespołu badawczego Zakładu Materiałów Funkcjonalnych UAM.

Stwierdzam, że przedstawiona do recenzji praca doktorska spełnia ustawowe wymogi i wnoszę o dopuszczenie mgr Doroty Jeziorek-Knioła do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

