

Zielona Góra, 24.02.2022.

Prof. dr hab. Mirosław R. Dudek
Uniwersytet Zielonogórski
Wydział Fizyki i Astronomii
ul. Szafrana 4a, 65-516 Zielona Góra

Recenzja rozprawy doktorskiej pt. „Zbadanie nieciągłych przemian fazowych w złożonych spinowych układach sieciowych przy pomocy eksperymentów komputerowych: trójwymiarowy model Ashkina-Tellera” napisanej przez Dorotę Jeziorek-Knioła.

Przedstawiona do recenzji praca doktorska mgr Doroty Jeziorek-Knioła dotyczy analizy nieciągłych przejść fazowych w trójwymiarowym modelu Ashkina-Tellera. Praca ma charakter pracy teoretycznej. Wykonana została ona w Zakładzie Fizyki Materiałów Funkcjonalnych Wydziału Fizyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu pod kierunkiem prof. UAM dr hab. Grzegorza Musiała. Dodam, że doktorantka jest współautorką ośmiu publikacji, w tym jedna z nich opublikowana została w prestiżowym czasopiśmie *Physical Review E*.

Główne wyniki badawcze to opracowanie metody badawczej opartej na metodzie kumulantów dla określenia linii nieciągłych przejść fazowych w modelu Ashkina-Tellera w przypadku silnych i słabych nieciągłych przejść fazowych. Szczegółowe wyniki to wykazanie znaczenia punktu Potts'a na diagramie fazowym dla trójwymiarowego modelu Ashkina-Tellera oraz bardziej precyzyjne określenie wartości punktów bifurkacji i punktów trójkrytycznych.

Struktura pracy doktorskiej to wstęp, sześć rozdziałów i wnioski z uzyskanych wyników. W rozdz. 1: przedstawione zostały podstawowe pojęcia mechaniki statystycznej. W rozdz. 2 wprowadzona została klasyfikacja przejść fazowych wg P. Ehrenfesta oraz teoria Landau'a przejść fazowych ciągłych. W rozdz. 3 można znaleźć krótkie przedstawienie przykładowych układów spinowych modelu Isinga, XY, Heisenberga, q-stanowego modelu Potts'a, modelu Ashkina-Tellera i przykładu gazu sieciowego oraz stopu wieloskładnikowego. W rozdziale 4. można znaleźć podrozdziały z wprowadzeniem do metody Monte Carlo w wersji algorytmu Metropolis'a, wprowadzeniem pojęć kumulant Binder'a, Challa oraz Lee-Kosterlitz'a a także informacji o wartościach parametrów przyspieszenia obliczeń przy przeprowadzonych w pracy symulacjach komputerowych w wyniku użycia programowania równoległego. W rozdziale 5. umieszczone zostały główne wyniki pracy i ich dyskusja dotyczące nieciągłych przemian fazowych w trójwymiarowym modelu Ashkina-Tellera w zakresie fragmentu linii przejść fazowych APFbF i FbG na diagramie fazowym dla tego modelu. Rozdz. 6. ma sens informacyjny o aplikacji o charakterze dydaktycznym przygotowanej przez doktorantkę dla modelu Isinga i której celem było pokazanie przejścia fazowego porządek-nieporządek z temperaturą jako parametrem sterującym.

Rozprawa doktorska dotyczy bardzo trudnego dla symulacji komputerowych zagadnienia modelowania nieciągłych przejść fazowych i to jeszcze w modelu Ashkina-Tellera o bardzo złożonym diagramie fazowym. Dlatego uważam, że układ pracy mógłby być trochę inny aby pomóc w zrozumieniu otrzymanych przez doktorantkę wyników. Zamiast przypominać podstawowe pojęcia dotyczące mechaniki statystycznej w sposób jakby to był kurs fizyki statystycznej sugerowałbym raczej dyskusję na temat modelowania nieciągłych przejść fazowych. Jeśli są rozdziały jak na przykład rozdz. 4.2 dotyczący metody kumulant Bindera stosowanej w pracy do wyznaczenia punktów przemian fazowych to przydałoby się opisanie tej metody w kontekście innych możliwych stosowanych metod .

Pytanie 1: Dlaczego w pracy wybrana została metoda kumulantów?

Pytanie 2: W jaki sposób kontrolowane są efekty skończoności próbki (liniowy rozmiar L) w stosowanych w pracy metodach kumulantów dla nieciągłych przejść fazowych?

Pytanie 3: W przypadku przejść fazowych nieciągłych długość korelacyjna w obu fazach jest skończona. Jak ma się ona do używanego w pracy liniowego rozmiaru próbki L w metodzie kumulantów?

Pytanie 4: Jakie zastosowano kryterium do uzyskania stabilnej gałęzi na fragmencie diagramu fazowego analizowanego w pracy doktorskiej? Przypomnę, że w dużo prostszym w porównaniu z modelem Ashkina-Tellera q -stanowym modelu Potts'a symulacje Monte Carlo są bardzo nieefektywne dla większych wartości q i aby na przykład uzyskać poprawne skalowanie rosnących domen (prawo potęgowe $t^{1/2}$ dla przypadku z niezachowanym parametrem porządku) liniowy rozmiar układu „spinów” Potts'a musi być co najmniej rzędu $L=1000$ w przypadku dwóch wymiarów przestrzennych. W przeciwnym razie wyniki zdominowane będą przez efekt skończoności układu. Podkreśla to jak bardzo trudny dla symulacji komputerowych jest model Ashkina-Tellera i jak bardzo ważne są zastosowane kryteria stabilności.

Przedstawione w pracy wykresy z wynikami dotyczącymi zachowania się kumulant sugerują poprawne zależności. Dlatego nie mam zastrzeżeń do wniosków wyciągniętych przez doktorantkę. Wyniki pokazują też ogrom pracy włożonej przez doktorantkę w ich uzyskanie.

Mam parę pytań w związku z używaną w pracy metodą Monte Carlo.

Pytanie 5: Jak realizowany był sposób dostępu do generowanych liczb losowych przez poszczególne procesy w przypadku symulacji metodą programowania równoległego?

Pytanie 6: Na str. 37 wprowadzone jest pojęcie kroku Monte Carlo używanego w pracy z odwołaniem się do algorytmu Metrolisa (The Journal of Chemical Physics (1953)) i doktorantka napisała „... jeden MCS kończy się, gdy każdy z węzłów sieci został odwiedzony raz (wybierany systematycznie lub losowo). Z kolei na str. 34 z kolei napisała, że na krok Monte Carlo składają się etapy od 4 do 9 z przedstawionego na tej stronie algorytmu. Prosiłbym

o doszczegółowienie/uzasadnienie co jest rozumiane przez krok Monte Carlo w pracy. Dodam, że używanie sekwencyjnego algorytmu wprowadza dodatkowe korelacje co może mieć istotne znaczenie dla uzyskanych wyników. Dzisiaj, uwzględniając wiedzę o symulacjach Monte Carlo używa się w przypadku układu z N węzłami sieci pojęcia jednego kroku MC odpowiadającemu N losowo wybranym węzłom sieci. To znaczy, że pewne spiny mogą być wybrane więcej niż raz a pewne wcale w trakcie jednego MCS (zob. też książkę *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Third Edition, David P. Landau, Kurt Binder, 2009.). W wielu zagadnieniach fizyki, np. związanych z perkolacją do wyznaczenia progu perkolacji na sieciach d -wymiarowych nie jest wskazane nawet losowanie węzłów osobno dla składowej x , y i z , tzn. osobne losowanie liczby losowej dla składowej, x , y i z . Losuje się od razu na całym zbiorze węzłów sieci aby zminimalizować korelacje.

Pytanie 7: Dotyczy interpretacji rys. 1.4.2 na str. 17 pokazującego schematycznie zależność potencjału chemicznego od temperatury. W opisie rysunku jest że nie dotyczy on przejścia fazowego I rodzaju. Dodatkowo w tekście jest wzór 1.4.3 ze stwierdzeniem, że na rys. 1.4.2 pierwsze pochodne potencjału względem temperatury są sobie równe w T_c . Rysunek 1.4.2 jednak ewidentnie nie sugeruje ciągłego przejścia fazowego z takimi samymi pochodnymi w T_c .

Zasadnicza uwaga techniczna: W części rysunków z wynikami badawczymi nie ma odniesienia literaturowego. Jeśli są wzięte z publikacji to należy wpisać odnośniki a w przeciwnym przypadku wyraźnie wpisać kto jest autorem wyników.

Niezrozumiały jest fragment dotyczący stwierdzenia czym jest parametr porządku w modelu Potts'a na str. 24.

Inne drobne uwagi dotyczą stylu i niezręcznych skrótów i literówek np.:

Uwaga 1: Na str. 32 jest napisane: „W programie komputerowym umieszczony zostaje model układu fizycznego...”

Uwaga 2: Wzór 1.3.4. jest niekompletny

Uwaga 3: Zdanie za wzorem 1.3.8 „...”, gdy spiny oddziałują, wtedy fluktuują...”

Uwaga 4: literówka w indeksie dla dla dwupunktowej funkcji korelacji $G^{(2)}$ na str 15.

Moje uwagi mają bardziej znaczenie techniczne. Praca zawiera wartościowe wyniki badawcze pokazujące bezpośredni wkład doktorantki w ich uzyskanie.

Podsumowując, rozprawa doktorska spełnia wszystkie wymagania stawiane rozprawom doktorskim. Duża część wyników jest opublikowana. Bardzo proszę o dopuszczenie rozprawy doktorskiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Miroslaw Dudek