

Doc. dr hab. Eligiusz Wajnryb
Polska Akademia Nauk
Instytut Podstawowych Problemów Techniki
Zakład Mechaniki i Fizyki Płynów
Pracownia Przepływów Lepkich

Warszawa, 5 września 2008

Recenzja pracy doktorskiej magister Agnieszki Małgorzaty Słowickiej

Praca doktorska pt. „Badanie metodą dynamiki molekularnej powstawania wybranych nanostruktur w emulsjach” wykonana pod kierunkiem doc. dr hab. Zbigniewa A. Walenty składa się ze wstępu, rozdział I, obszernego rozdziału II podzielonego na 5 rozdziałów, podsumowania stanowiącego rozdział III, obszernej bibliografii liczącej 79 pozycji. Bardzo pomocny przy lekturze pracy jest zamieszczony po rozdziale III wykaz ważniejszych oznaczeń. Praca liczy 88 stron i jest napisana i w sposób przejrzysty i logiczny.

Rozdział I, „Wstęp” stanowi obszerny przegląd zastosowań mikromechaniki we współczesnej fizyce, inżynierii, biologii, medycynie, chemii fizycznej i farmakologii. Podkreślone jest ogromne zapotrzebowanie na mikrouządzenia w skali mikrometrowej takie jak mikropompy, mikrorotatory, mikrosensory, które ogólnie określane są jako mikrochipy. W pracy badany jest przepływowy aspekt budowy tych urządzeń. W szczególności problemy związane z modelowaniem mikroprzepływów w mikrokanałach, które są istotną częścią tych urządzeń, są głównym zagadnieniem rozważanym w pracy doktorskiej.

Rozdział II pt. „Modelowanie nanostruktur w emulsjach” przynosi omówienie badanego problemu, jakim jest zjawisko osadzania się cząstek na powierzchni kropli emulsji na poziomie molekularnym. Autorka rezygnuje z opisu ciągłego faz wchodzących w skład badanego układu na rzecz opisu klasycznego (nie kwantowego) opisu molekularnego. Wymaga to istotnych uproszczeń, takich jak np. traktowanie złożonej molekuly jako pojedynczego atomu, który zachowuje jedynie niektóre charakterystyki rzeczywistej molekuly. Także oddziaływania między molekułami opisane są bądź potencjałem Lennarda-Jonesa lub potencjałem „generic” zawierającym 6 parametrów. Wbrew temu, co pisze autorka potencjał ten nie wydaje się być wystarczająco ogólny, w szczególności nie pokrywa przypadku potencjału Yukawy,

ekranowanego potencjału Coulombowskiego. Nie jest też oczywiste, jaką dokładnie metodą rozwiązywane są równania różniczkowe ruchu, czy są parametry kontrolujące dokładność rozwiązań i jaka jest ostateczna dokładność otrzymanych wyników.

W dalszej części rozdziału II omówiona jest metoda weryfikacji modeli w symulacjach. Główną metodą jest badanie postaci promieniowej funkcji rozkład, (Radial Distribution Function, RDF), której definicja została podana w równaniu ((2.4.1). Przeprowadzono porównania symulowanej i oczekiwanej postaci tej funkcji dla gazu, cieczy i ciała stałego. Pozwoliło to na wstępne testowanie parametrów potencjału oddziaływania cieczy użytych do symulacji. Kolejnymi wielkościami pozwalającymi weryfikować poprawność założonych parametrów były lepkość postaciowa, równanie (2.4.2), współczynnik autodyfuzji, równanie (2.4.3), współczynnik przewodnictwa cieplnego, równanie (2.4.4) oraz lepkość objętościowa, równanie (2.4.5). Nie są podane jawne mikroskopowe definicje tensora naprężeń oraz strumienia energii, które występują w wyżej wymienionych formułach Greena-Kubo.

Następnie w rozdziale II opisane jest modelowanie separacji cieczy w emulsji. Początkowo doktorantka modelowała ciecze proste oddziałujące za pomocą zmodyfikowanego potencjału Lenarda_Jonesa, równanie (3.1.1). Zamieszczone są wyniki symulacji tworzenia się kropli cieczy, której molekuly były początkowo rozmieszczone w komórce sześcienniej. Po wstępnym okresie skalowania prędkości w celu stabilizacji temperatury układ zwykle dochodził do stanu, w którym tworzył zwartą kroplę. Podobne eksperymenty numeryczne zostały przeprowadzone dla bardziej złożonego modelu dipolarnego a następnie dla powszechnie stosowanego modelu TIPS2, który zawiera jeden atom tlenu i dwa atomy wodoru. Badano czas niezbędny do uformowania się kulistej kropli. Doktorantka przeprowadziła także badania tworzenia się kropli oleju w wodzie oraz kropli wody w oleju. Porównując wyniki tych symulacji stwierdzono, że kształt kropli oleju był o wiele bardziej stabilny niż kropli wody. W części 3 rozdziału III autorka badała wyizolowane struktury, które nie powinny oddziaływać ze swoimi repetycjami. W tym celu struktury te jako dane początkowe w programie *Moldy* umieszczane są w znacznej odległości. Wydaje się, że korzystniejsze numerycznie byłoby zastosowanie programu wykonującego obliczenia w nieperiodycznym reżimie, na co nie pozwala program *Moldy*.

W części czwartej rozdziału II autorka zajmuje się modelowanie warstwy cieczy między fazami emulsji i przechodzi do głównego celu pracy jakim jest modelowanie warstwy cieczy między fazami emulsji. Szczegółowo, choć głównie jakościowo omówione są wyniki szeregu

