

Bydgoszcz, 15 listopada 2021

Prof. zw. dr hab. inż. Adam Gadomski  
Politechnika Bydgoska im. J. J.  
Śniadeckich,  
Instytut Matematyki i Fizyki,  
Zakład Fizyki, Zespół Modelowania  
Procesów Fizykochemicznych,  
Al. Kaliskiego 7, 85-796 Bydgoszcz  
Tel./Fax: 52-3408697(...43)  
Email: agad@pbs.edu.pl

## Recenzja

rozprawy doktorskiej Pani Magister Aleksandry Słapik  
pt. *ANOMALOUS TRANSPORT IN NONEQUILIBRIUM SYSTEMS:  
FROM NEGATIVE MOBILITY TO PARTICLE SEPARATION*, wykonanej pod  
kierunkiem dr. hab. Jakuba Spiechowicza, prof. U.Ś.

Pani Magister Aleksandra Słapik w przedstawionej do recenzji rozprawie doktorskiej zajęła się efektem ujemnej ruchliwości cząstek; w świetle pewnego nazewnictwa fizykochemicznego można także mówić o cząsteczkach. Tematem wiodącym tej rozprawy doktorskiej jest szczególne zjawisko transportu w układach nierównowagowych, określane jako ujemna ruchliwość. Zjawisko to, na pierwszy rzut oka sprzeczne z codzienną intuicją, manifestuje się w następujący sposób, a mianowicie, kiedy cząstka poruszająca się w układzie nieliniowym w warunkach nierównowagowych poddana jest działaniu stałej siły, a wypadkowy kierunek jej przemieszczenia jest przeciwny do kierunku działającej siły. W powierzonej do recenzji pracy z użyciem arsenału metod numerycznych zbadano własności i mechanizmy zjawiska ujemnej ruchliwości. Zademonstrowano, jak efekt ten może być wykorzystany do mechanicznej separacji różnych typów cząstek. W użyciu urządzeń mikroprzepływowych wykonano szereg eksperymentów, w których za pomocą zjawiska ujemnej ruchliwości udało się rozdzielić cząstki o różnych rozmiarach. Nie podjęto się jednak dotychczas badań dotyczących kontrolowalnej separacji cząstek o określonych własnościach fizykochemicznych w kontekście ich udziału w objętości odpowiadającej im heterogenicznej mieszaniny. W ocenianej pracy określono warunki, które umożliwiają kontrolowaną izolację cząstek na podstawie różnicy w ich ruchliwości. Proponowane numeryczne metody fizykalne separacji cząstek mogą stać się przydatne w przypadku mieszanin, w których rozdzielanie składników jest zadaniem trudnym, co ma miejsce np. w przypadku układów biologicznych.

Autorka tej rozprawy doktorskiej oparła jej treść na merytorycznej zawartości czterech na ogół wieloautorskich prac, w których to pracach Pani Aleksandra Słapik jest zawsze pierwszą w kolejności autorką. Są to następujące prace [A1-A4]:

A1: "Negative mobility of a Brownian particle: strong damping regime." *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* 55 (2018): 316-325; 18 cytacji w Google Scholar (GS).

A2: "Tunable mass separation via negative mobility." *Physical Review Letters* 122.7 (2019): 070602; 20 cytacji w GS.

A3: "Temperature-induced tunable particle separation." *Physical Review Applied* 12.5 (2019): 054002; 7 cytacji w GS.

A4: "Tunable particle separation via deterministic absolute negative mobility." Scientific Reports 10.1 (2020): 16639; 0 cytacji w GS.

W pracy A1 zbadano efekt ujemnej mobilności w kontekście jego składowej inercyjnej. Zdefiniowano trzy mechanizmy odpowiedzialne za ten efekt. Zwrócono uwagę, że tak określony efekt ujemnej mobilności wiąże się z kontr-efektem silnego tłumienia. Pełny mechanizm tego zjawiska jest oparty o model bazujący na równaniu Langevina z potencjałem periodycznym i ze stałą siłą wymuszającą i z zastosowaniem szumu gaussowskiego, nieskorelowanego, a o wartości średniej równej zero.

W pracy A2 (opublikowanej w prestiżowym *Physical Review Letters*) przyglądnięto się bliżej mechanizmowi separacji cząsteczkowej. Zaprezentowano w nim efektywny mechanizm separacji cząsteczkowej oparty o efekt ujemnej mobilności cząsteczek. Nowum tej oraz trzech pozostałych prac zaprezentowanych do oceny przez Kandydatkę jest przeskalowanie (niezależnych) zmiennych (położenie, czas) i najważniejszych parametrów w użytym modelu Langevina (ruchliwości; dyfuzyjności lub intensywności szumu, amplitudy siły, etc.), w tym specyficznie w przypadku pracy A2: masy cząsteczkowej (określanej również jako masa dyfundującej cząstki). Badania przeprowadzone i opisane w A2 mogą, zdaniem Autorki tej rozprawy doktorskiej, stanowić swoisty przewodnik dla eksperymentatorów - głównie tych pracujących w nano- oraz biotechnologii i biomedycynie – w obszarze rozdzielania znajdujących się w mieszaninie nano- i mikrocząstek, a także zdrowych i chorych komórek w organizmach zarówno ludzkich, jak i zwierzęcych, nie wykluczając także komórek roślinnych.

W pracy A3 opisano również mechanizm rozdziału cząstek podlegającej dynamice Langevina, tym razem jednak sterowanie tym mechanizmem odbywa się poprzez obecność fluktuacji w środowisku cieplnym, które, jak na początku swojej rozprawy informuje nas jej Autorka, ma charakter tzw. małej przestrzeni (*small-scale*). W tym ograniczonym przestrzennie środowisku „małoskalowym” energia termiczna jest porównywalna co do jej średniej wartości z innymi rodzajami występujących w nim energii, np. oddziaływań międzycząsteczkowych czy też „słabych” hydrodynamicznych. Patrząc na rzecz z innej strony, przy porównywalnych w swojej wielkości energiach środowiska, przypisywanych cząstkom Browna, czyni to prawie automatycznie, środowisko to jako zawierające elementy trudne do rozdzielania. Właściwa skala trudności polega m.in. na tym, że cząsteczki – z chemicznego punktu widzenia patrząc - mogą mieć porównywalną objętość własną, ale różnić się, tak jak komórki rakowe i zdrowe, gęstością zawartego w nich biomateriału. (W tym przypadku metoda separacji cząsteczkowej oparta o opis rozdzielania zawarty w A1-A3 może stanowić metodę skutecznego rozdziału komórek chorych i zdrowych w organizmie.)

W pracy A4 (rok opublikowania 2020), która nie doczekała się jeszcze odnotowania w literaturze przedmiotu, podjęto zagadnienie mechanizmu separacji cząsteczkowej z użyciem metody ujemnej mobilności traktowanej nie jako zmienna stochastyczna, a deterministyczna, a stanowiąca ważny i kluczowy parametr modelu. Zademonstrowano, że jeśli rozróżnienie cząsteczek następuje wg kryterium ich wielkości, to opierając kontrolę na trzech sterujących parametrach modelu można dokonać właściwej separacji obiektów, co może mieć kluczowe znaczenie technologiczne, w szczególności, że typowo separacja cząsteczkowa, np. odsalanie wody morskiej, odbywa się z udziałem określonej wielkości membran, do dializy w naszych organizmach służą np. inne naturalne membrany – nerki, a w pracy A4 (a także w pozostałych A1-A3), zaproponowano mechanizm bezmembranowego rozdzielania cząsteczek, bez udziału sita molekularnego lub podobnego instrumentu selekcyjnego; również błony komórkowe i obecne w nich wyspecjalizowane proteiny, tj. kanały jonowe, stanowią takie morfologiczne selektory jonów czy też również biomolekuł o różnych masach cząsteczkowych i kształtach, a także podatności na dynamikę pola agitującego ich do określonego typu ruchu. Można więc na tym etapie skonkludować, że Autorka rozprawy doktorskiej jest jednym ze współautorów

innowacji koncepcyjno-teoretycznej w zakresie bezmembranowego rozdziału składników mieszaniny cząsteczkowej (komórkowej, gdy rozumieć, że rzecz dzieje się, co pewnie bardziej skomplikowane, obszary tkanki – lepkością matrycy ekstracelularnej).

Czego Autorowi tej recenzji nieco brakło w tej pracy oraz przedstawionych do oceny pracach A1-A4 to rozważenia także składowej sprężystej środowiska. Autorka świetnie poradziła sobie ze składową lepkością środowiska podlegającego separacji cząstek Browna, ale środowisko małe gabarytowo (posiadające elastyczne ściany), będące takim środowiskiem w małej skali, musi zawierać również składową sprężystą, choćby w budowaniu mechanizmu tej separacji. Ona pozostała trochę w tym modelu zmienną ukrytą (*hidden variable*), może łatwiej byłoby ją dołączyć, gdyby dało się zamienić proponowane równanie Langevina (1), (7) lub (12) na równanie typu Fokkera-Plancka (FP), o czym pisze Autorka, a co nie da się zrobić, jak konstatują zgodnie współautorzy prac A1-A4. Można popuścić wodze fantazji i pomyśleć, że gdyby się dało, to do równania typu FP koniecznie trzeba by było dołożyć warunki brzegowe, również takie z elastycznym odbiciem „fali” gęstości prawdopodobieństwa znalezienia się cząstki Browna w określonym miejscu małej przestrzeni, w określonym momencie czasu. Z kolei, trudno byłoby uniknąć skończonego charakteru tak wprowadzanych warunków brzegowych, co prowadziłoby prawdopodobnie do zredukowanej mocno ważności uzyskanych tą drogą rozwiązań, por. dyskusja w „Finite volume effects in a model grain growth”, *Physica A* **325/1-2** (2003) 284-291. Ponadto, Autor tej wypowiedzi podjąłby, co nie zostało poruszone w pracach A1-A4, chętnie dyskusję z Autorką nt. nierównowagowego z termodynamicznego punktu widzenia charakteru opisywanego procesu, np. jak daleko/blisko jest on i w jakich warunkach parametrycznych od stanu równowagi – czy bardziej w sensie bliskiej temu stanowi termodynamiki Onsagera czy też produkującej struktury dyssypatywne termodynamiki stanów odległych od równowagi wg Proggina-Glansdorffa?

Reasumując, w rozprawie bardzo rzetelnie od strony fizycznej pokazano *explicite* mechanizm nierównowagowego transportu cząstek Browna, których ruch odbywa się w reżimie tzw. ujemnej ich ruchliwości, por. *Figure 1* i następne. Przy okazji, należy zwrócić uwagę, że warunek prędkości początkowej w modelu ( $x$  z kropką dla  $t=0$ ) został w legendzie do *Figure 1* wybrany jako  $\frac{1}{2}$ , natomiast z wykresów widać, że ma on wartość jeden.

Przedyskutowano bardzo klarownie podstawowe problemy związane z użyciem mechanizmu Langevina z ujemną ruchliwością do rozdziału obiektów znajdujących się w środowisku małoskalowym, a więc o dużej dozie realności w opisie problemu będącego tym z gatunku kuszących do technologicznego zastosowania, bo przede wszystkim bez uwzględnienia użycia membran czy też sit molekularnych, co znacznie potania proces separacji elementów aktywnego środowiska zmieszanego, również takiego o charakterze naturalnym, por. treść monografii *Multiscale Locomotion* <http://zmpf.imif.utp.edu.pl/jsbmw2019/>.

Z bardzo nielicznych usterek o charakterze technicznym powinno się wymienić nieco niedokończone w swoim stylu referencje literaturowe ze zmieniającym się w nich tzw. porządkiem konfiguracyjnym tudzież przyjętym stylem ich prezentowania. Wzmiankowane w tym miejscu, a przecież w sumie bardzo nieliczne niekonsekwencje w prezentacji materiału, przede wszystkim o charakterze technicznym, nie umniejszają jednak jakkolwiek bardzo porządnie przeprowadzonej redakcji poddanej ocenie rozprawy.

## PODSUMOWANIE

W podsumowaniu recenzji, uważam, że napisana w dobrze sprawdzonym pod względem gramatycznym języku angielskim praca doktorska Pani Magister Aleksandry Słapak pt. *Anomalous transport in nonequilibrium systems: From negative mobility to particle separation*, wykonana pod kierunkiem dr. hab. Jakuba Spiechowicza, profesora UŚ, spełnia kryteria istotności podjętego problemu transportu anomального w układach

nierównowagowych z cechą ujemnej mobilności, zastosowanego do rozdziału mieszanin cząsteczkowych i podobnych, o charakterze biomedycznym lub biotechnologicznym.

Stanowi to podstawę do stwierdzenia, że powierzona mi do recenzji rozprawa doktorska, wykonana w Instytucie Fizyki Wydziału Nauk Ścisłych i Technicznych Uniwersytetu Śląskiego, spełnia w sposób jednoznaczny wymogi stawiane rozprawom doktorskim zgodnie z artykułem 187, Prawa o Szkolnictwie Wyższym i Nauce z dnia 20 lipca 2018 r. (o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki). W związku z tym wnioskuję z przyjemnością o dopuszczenie Pani Magister Aleksandry Słapik do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Adam Gadomski

Dyrektor  
Instytutu Matematyki i Fizyki  
*Adam Gadomski*  
prof. dr hab. inż. Adam Gadomski (7822)