

## Recenzja dorobku naukowego

### dr inż. Jana Stanisława WRÓBLA w ramach postępowania o nadanie stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych w dyscyplinie inżynieria materiałowa

Podstawą formalną opracowania niniejszej recenzji jest uchwała Rady Dyscypliny Inżynieria Materiałowa Politechniki Warszawskiej nr 307/II/2023 z dnia 24 lutego 2023 roku w sprawie zmian w składzie komisji habilitacyjnej w postępowaniu w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego Panu dr inż. Janowi Stanisławowi Wróblowi, w wyniku której nastąpiło powołanie mojej osoby jako recenzenta.

#### Informacje o dr inż. Janie Stanisławie Wróblu oraz dane bibliometryczne

Pan dr inż. Jan Stanisław Wróbel urodził się 28 maja 1983 roku. W chwili obecnej jest pracownikiem Politechniki Warszawskiej i pracuje jako adiunkt badawczy. Habilitant uzyskał stopień doktora nauk technicznych w dyscyplinie inżynieria materiałowa broniąc dysertację doktorską pod tytułem „Modelowanie ab initio właściwości faz międzymetalicznych La-X (X = Mg, Al)”. Opiekunem naukowym tych badań był Prof. Krzysztof J. Kurzydłowski. Tematyka rozprawy doktorskiej była kontynuacją metodyczną zagadnień poruszanych w pracy magisterskiej, w której Habilitant zajmowała się modelowaniem właściwości strukturalnych tlenku cynku z zassaniem pierwszych zasad.

Po obronie pracy magisterskiej dr inż. Jan Stanisław Wróbel pracował jako programista w Interdyscyplinarnym Centrum Modelowania Komputerowego i Matematycznego, Uniwersytet Warszawski. Następnie był pracownikiem naukowym w Culham Centre for Fusion Energy w Anglii i specjalistą naukowo-badawczym w Politechnice Warszawskiej. Kolejny etap Jego kariery naukowej to praca na stanowisku adiunkta badawczego w Centrum Cyfrowej Nauki i Technologii Uniwersytetu Kardynała Stefana Wyszyńskiego w Warszawie, a od września 2020 roku na Wydziale Inżynierii Materiałowej Politechniki Warszawskiej.

Analiza danych bibliometrycznych, zawartych w bazie Scopus na dzień 15.04.2023 roku, wykazała, że dr inż. Jan Stanisław Wróbel może pochwalić się imponującym dorobkiem naukowym w tym 42 publikacjami notowanymi w tej bazie o łącznej liczbie cytowań 1121. Po uwzględnieniu liczby autocytowań wszystkich współautorów liczba ta wynosi 931, co już samo w sobie jest parametrem wskazującym na pozycję naukową habilitanta na świecie. Należy zwrócić uwagę, iż roczna liczba cytowań w ostatnich dwóch latach przekracza 200, co jest znakomitym osiągnięciem. Ponadto publikacja pt. „*Outstanding radiation resistance of tungsten-based high-entropy alloys*” może pochwalić się 259 cytowaniami od roku 2019, co nie wymaga dalszego komentarza. I nie ma znaczenia fakt, iż Habilitant jest w tym przypadku 8 współautorem, biorąc pod uwagę znakomite towarzystwo współautorów z Los Alamos National Laboratory, Argonne National Laboratory czy też Pacific Northwest National Laboratory. Komentowanie tego jest zbędne. W tym kontekście nie zaskakuje pozostały dorobek dr inż. Jana Stanisława Wróbla np. w *Acta Materialia* i innych światowych

czasopismach. Wartość parametru  $h$  wynosi 18, co w kontekście przedstawionych danych bibliometrycznych nie jest zaskakujące i potwierdza niezwykle wysoki poziom prowadzonych badań. Ogromna większość publikacji Habilitanta powstała we współpracy z ośrodkami zagranicznymi znakomitej klasy z USA, Wielkiej Brytanii i Chin.

Aktywność naukowa Habilitanta po obronie doktoratu realizowane były podczas 2,5-letniego stażu podoktorskiego (post-doc) w grupie prof. Sergei'a Dudarev'a w Culham Centre for Fusion Energy (CCFE) w Anglii oraz od 2015 r. na Wydziale Inżynierii Materiałowej Politechniki Warszawskiej. Zakres badawczy obejmował zagadnienia stabilności fazowej i właściwości wieloskładnikowych stopów metali. Kolejne obszary dotyczyły rozwoju metod modelowania materiałów i prace czysto eksperymentalne, związane z realizowanymi projektami badawczymi. Ostatni obszar badawczy to działania konsultacyjne i eksperckie.

Dr inż. Jan Stanisław Wróbel może pochwalić się szeroką współpracą naukową z licznymi ośrodkami badawczymi na świecie. Wykaz odbytych staży obejmował m.in. następujące jednostki: Université Paris-Saclay we Francji, Service de Recherches de Métallurgie Physique w CEA, Culham Centre for Fusion Energy w Wielkiej Brytanii.

Aktywność po zdobyciu stopnia doktora nauk technicznych Habilitant podsumował 20 bardzo dobrymi i licznie cytowanymi publikacjami naukowymi, jak również kierowaniem i realizacją licznych projektów badawczych, w tym 9 zakończonych i 5-oma w trakcie realizacji

**Podsumowując tę część recenzji należy jednoznacznie stwierdzić, że Pan dr inż. Jan Stanisław Wróbel w okresie od obrony doktoratu w sposób istotny powiększył swój dorobek naukowy oraz stał się w tym okresie rozpoznawalnym pracownikiem naukowym, o czym świadczy liczba i jakość cytowań naukowych. Ponadto nawiązał współpracę z licznymi znakomitymi jednostkami naukowymi, co udokumentował świetnymi i cytowanymi wielokrotnie publikacjami. Uzasadnia to z należytą powagą stwierdzenie, że spełnia wymagania by stać się formalnie samodzielnym pracownikiem naukowym.**

#### **Ocena osiągnięcia naukowego**

Habilitant, jako osiągnięcie naukowe przedstawił cykl publikacji pod tytułem „*Badanie przy użyciu metod ab initio stabilności fazowej oraz właściwości wieloskładnikowych stopów metali do zastosowań w reaktorach syntezy termojądrowej*”. Osiągnięcie to obejmuje 11 powiązanych tematycznie publikacji naukowych opublikowanych w bardzo dobrych czasopismach naukowych o światowym zasięgu. Wszystkie prace mają charakter współautorskich, a udział merytoryczny w ich powstaniu, zadeklarowany przez dr inż. Jana Stanisława Wróbla jest dominujący lub znaczny (wg oświadczeń Habilitanta i pozostałych współautorów). Współautorskość przedstawionych do oceny prac, jest zdaniem Recenzenta elementem bardzo pozytywnym, gdyż wskazuje na umiejętność nawiązania współpracy i jej owocnej realizacji. Ponadto, w chwili obecnej, indywidualizm w nauce (w tym publikacyjny) jest gwarancją zamknięcia się na rozwój a wręcz regres naukowy i spotęgowanie samouwielbienia naukowego.

Wszystkie przedstawione do oceny publikacje charakteryzują się wysoką wartością współczynnika wpływu IF, w tym ponad 13 w przypadku czasopisma Science Advances. W przedstawionym cyklu mamy do czynienia wyłącznie z materiałami recenzowanymi w trudniejszej, klasycznej drodze publikacyjnej, co w dobie dzisiejszej tendencji do przyspieszania awansu naukowego, wymaga szczególnego docenienia.

Dostarczona dokumentacja, wraz z autoreferatem, jednoznacznie wskazuje, że Habilitant był bardzo dobrze przygotowany do doboru tematyki i metodyki badawczej, jak również do określenia spójnych celów i zakresu prowadzonych analiz. Jak wynika z dokumentacji Dr inż. Jan Stanisław Wróbel interesował się zagadnieniami modelowania *ab initio* już od czasów pracy magisterskiej. Podstawą sukcesu w takich przypadkach, jest i zawsze będzie, bardzo dobre i szczegółowe rozpoznanie analizowanej problematyki, co jest widoczne w sposób bezdyskusyjny w dołączonych publikacjach. Dzięki temu Habilitant w sposób klarowny i jednoznaczny potrafił zdefiniować problem badawczy tj. opartego na metodzie DFT modelowania stabilności fazowej oraz właściwości wieloskładnikowych stopów metali do zastosowań w nowoczesnych konstrukcjach, w tym przede wszystkim w reaktorach syntezy termojądrowej, co stanowi jedno z głównych wyzwań w doborze materiałów dedykowanych technologii reaktorów syntezy termojądrowej. Habilitant poddał analizom następujące materiały: stale typu 304, 316 oraz EUROFER, wolfram i jego stopy oraz stopy wysokoentropowe np. Fe-Cr-Co-Mn-Ni. Główną metodą badawczą zastosowaną przez Habilitanta była metoda obliczeniowa DFT, pozwalająca na wykonywanie symulacji w skali atomowej, której najważniejszą zaletą jest to, że w celu wyznaczenia podstawowych właściwości materiału nie są wymagane dane eksperymentalne.

Do najważniejszych osiągnięć Dr inż. Jana Stanisława Wróbla zaliczyć należy:

- Ocenę stabilności fazowej stopów Fe-Cr-Ni o strukturze typu *fcc* i *bcc* – w ramach tych badań Habilitant opracował oparty na metodzie DFT, który umożliwił badanie stabilności fazowej i właściwości stopów Fe-Cr-Ni o strukturze *fcc* i *bcc* oraz generowanie reprezentatywnych struktur tych stopów do dalszych badań obliczeniowych. Trudność tego zagadnienia wynikała na znalezieniu najstabilniejszych konfiguracji magnetycznych w strukturach ściennie i przestrzenie centrowanych. Do symulacji zastosowano metodą funkcjonału gęstości oraz metodą rozwinięcia klastrowego oraz Monte Carlo.
- Ocenę stabilności fazowej i właściwości stopów o wysokiej entropii – to zagadnienie oparte zostało na rozwinięciu modelu używanego w przypadku stopów potrójnych typu Fe-Cr-Ni. Habilitant zastosował go do charakterystyki stopów pięcioskładnikowych typu W-Ta-V-M-Nb, co było pierwszym rozwiązaniem tego typu na świecie. Z symulacji wynika, że stopy tego typu wykazywać będą tendencję do tworzenia faz międzymetalicznych typu Mo-Ta i V-W, zwiększając tendencję do pęknięcia. Podobnym symulacjom poddano stopy Fe-Cr-Mn-Ni i Cr-Ta-Ti-V-W. Badania te realizowano w ramach projektu HOMING (FNP) i we współpracy z laboratorium w Los Alamos, gdzie wyniki uzyskanych symulacji poddano weryfikacji eksperymentalnej na rzeczywistych stopach.
- Ocenę właściwości i roli defektów punktowych w stopach z punktu widzenia stabilności fazowej – co wynika z potencjalnego zastosowania analizowanych materiałów w reaktorach jądrowych i syntezie termojądrowej. Habilitant wykazał, że energie tworzenia, objętości relaksacji oraz zmiany momentów magnetycznych spowodowanych obecnością wakansu lub rodzimego atomu międzywęzłowego typu dumbbell są uzależnione zarówno od stężenia poszczególnych pierwiastków jak również od uporządkowania bliskiego zasięgu w stopie oraz lokalnego otoczenia

defektu. Właściwości defektów punktowych zależą również od uporządkowania bliskiego zasięgu w stopie. Habilitant opisał również rolę defektów punktowych na stabilność składu fazowego wolframu poddanego działaniu czynnika radiacyjnego. Na tej podstawie zaproponowano hipotezę, że za klastrowanie atomów Re w napromieniowanych stopach W-Re odpowiadają wakanse (pomimo rozpuszczalności renu w wolfrامية na poziomie 30 %). Dr inż. Jan Stanisław Wróbel zaproponował model stopów W-Re z założeniem, że wakanse występujących w tych stopach stanowią „trzeci pierwiastek”. Habilitant rozwinął model do formy czteroskładnikowej W-Re-Os.

- Rola stężenia elektronów walencyjnych z punktu widzenia wzajemnej stabilności faz – Habilitant opracował nową metodą szacowania względnej stabilności fazowej składników w magnetycznych stopach typu HEA, w oparciu o przybliżenie ciasnego wiązania RBA. Pozwala to na pokonanie dotychczasowych ograniczeń metod DFT+CA+MC, poprzez rozwinięcie modelu RBA o model magnetyzmu Stonera, wprowadzając efektywny parametr Stonera.

Z powyższej charakterystyki rezultatów prac Habilitanta wynika, że w ramach głównego osiągnięcia można wyodrębnić zagadnienie:

- Stabilności fazowej i właściwości wybranych stopów wieloskładnikowych dedykowanych aplikacjom w energetyce jądrowej;
- Opracowania nowych procedur pozwalających na poszerzenie metod obliczeniowych bazujących na DFT do badań stabilności fazowej i właściwości stopów wieloskładnikowych.

Dr inż. Jan Stanisław Wróbel deklaruje, że kwestie związane z symulowaniem stabilności fazowej i właściwości użytkowych stopów metali w tym zwłaszcza wieloskładnikowych, jak również rozwój metod modelowania materiałów, stanowią nadal *clou* Jego przyszłej aktywności naukowej. Co interesujące i budzące wielkie nadzieje, Habilitant obrał również trzeci kierunek aktywności, związany z eksperymentalną weryfikacją Swoich symulacji. Budzi to bowiem nadzieję, na nawiązanie współpracy z polskimi jednostkami badawczymi, w szerszym zakresie niż dotychczas.

Należy przyznać, że analiza dostarczonej dokumentacji oraz zawartych w niej treści merytorycznych, nie daje zbyt dużych możliwości na uwagi krytyczne. Ze względu na typowo naukowy charakter etatu Habilitanta, nie można się również odnieść do działalności dydaktycznej i organizacyjnej.

**Powyższa charakterystyka osiągnięcia naukowego wskazuje na niezwykle wysoki poziom merytoryczny badań prowadzonych przez dr inż. Jana Stanisława Wróbla. Są one przemyślane i zaplanowane z nadrzędnym celem jakim było opracowanie nowych procedur obliczeniowych bazujących na metodzie DFT dedykowanych stopom wieloskładnikowym przeznaczonym do zastosowań w energetyce jądrowej oraz charakterystyce ich właściwości użytkowych i stabilności fazowej, co jest niezwykle istotnym zagadnieniem decydującym o doborze materiałów do tego typu zastosowań. Badania te Habilitant prowadził w światowej klasy zespołach badawczych, a uzyskane wyniki stanowią jego samodzielny i niepodważalny wkład o charakterze interdyscyplinarnym w dyscyplinę naukową inżynieria materiałowa.**

## Wniosek końcowy

Przedstawione przez dr inż. Jana Stanisława Wróbla osiągnięcie naukowe, w postaci cyklu 11 merytorycznie spójnych recenzowanych publikacji, zatytułowane „**Badanie przy użyciu metod ab initio stabilności fazowej oraz właściwości wieloskładnikowych stopów metali do zastosowań w reaktorach syntezy termojądrowej**” stanowi samodzielny, oryginalny i istotny wkład Habilitanta w rozwój dyscypliny inżynieria materiałowa. Przeprowadzone przez Habilitanta badania charakteryzują się precyzją i spójnością w sformułowanych założeniach badawczych, doskonałone dobranej i twórczo rozwijanej metodyce badań, jak również w uzyskanych wynikach i ich prawidłowej interpretacji. Jako całość przedstawiona dokumentacja stanowi doskonały przykład prawidłowo rozpoznanej, zaplanowanej i zrealizowanej dojrzałej koncepcji naukowo-badawczej.

**Stwierdzam, że całokształt osiągnięć naukowych dr inż. Jana Stanisława Wróbla spełnia bezdyskusyjnie ustawowe kryteria stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego nauk inżynieryjno-technicznych w dyscyplinie inżynieria materiałowa.**

