

Warszawa, 7.02.2023 r.

Prof. dr hab. Wojciech Grochala
Laboratorium Technologii Nowych Materiałów Funkcjonalnych
Centrum Nowych Technologii Uniwersytetu Warszawskiego
Żwirki i Wigury 93, 02-089 Warszawa

Opinia o osiągnięciu naukowym oraz całokształcie dorobku naukowego pana dr. Jana Stanisława Wróbla

Według przedłożonej mi dokumentacji związanej z wnioskiem Pana dr. Jana Stanisława Wróbla do Rady Doskonałości oraz Rady Naukowej Dyscypliny Inżynieria Materiałowa Politechniki Warszawskiej o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego w dziedzinie inżynierii materiałowej, badania aplikanta powiązanie z osiągnięciem przedstawianym do oceny dotyczą opisu teoretycznego stopów metali, w szczególności tzw. stopów o wysokiej entropii. Badania koncentrowały się na układach mogących stanowić elementy reaktorów termojądrowych. Dalekosiężnym celem badań było opisanie cech fizykochemicznych stopów, ich (w szerokim znaczeniu) struktury i stabilności, w tym tendencji do separacji fazowej, tworzenia wakansów, struktury elektronowej i magnetycznej komponentów, etc.

Wyniki badań opisane zostały w jedenastu pracach oryginalnych. Pan dr Wróbel występował w nich czterokrotnie jako pierwszy autor, oraz trójrotnie jako jedyny autor korespondencyjny. Badania opisane w w./wym. pracach opublikowanych w latach 2015-21 są w znacznej mierze wynikiem realizacji stażu podoktorskiego dr. Wróbla w grupie prof. Dudareva (w latach 2013-5) oraz intensywnej następczej współpracy z tym uczonym, także w projekcie EUROfusion. We wszystkich wymienionych jedenastu wieloautorskich pracach współautorami są prof. S. L. Dudarev lub / i prof. D. Nguyen-Manh (obaj z Wielkiej Brytanii).

Ponadto, współautorami prac są często inni „*senior authors*”, np. w czterech publikacjach współautorem jest prof. K. K. Kurzydłowski (Polska), a w nielicznych także dr hab. T. Wejrzanowski (Polska), prof. P. M. Mummery (USA), oraz prof. R. Goodall (UK). Nie jest to zatem – prostszy w ocenie – przypadek samotnego prowadzenia badań i jednoautorskiego publikowania. Zasadne jest więc postawienie pytania o realny udział i wkład habilitanta w prowadzone badania.

Oświadczenia współautorów nie pozostawiają wątpliwości, że rola dr. Wróbla w konceptualizację większości publikacji, powstanie wyników obliczeniowych i ich analizę była bardzo ważna. W sześciu pracach rola ta została usankcjonowana pierwszym miejscem dr. Wróbla na liście autorów lub przypisaniem Mu roli autora korespondencyjnego. Przy tym w dwóch pracach, w których pierwszymi autorami są D. Sobieraj oraz M. Fedorov, dr Wróbel sprawował opiekę naukową nad tymi doktorantami wspólnie z prof. Nguyen-Manh. Można zatem wywnioskować, iż rola dr. Wróbla przerastała tę, jakiej zwyczajowo oczekujemy od przeciętnego uczestnika stażu podoktorskiego; Jego wkład w zaplanowanie i powstanie badań, analizę wyników oraz powstanie publikacji naukowych był kluczowy i miał charakter pracy typowej dla „starszego autora”.

Przedstawiony dorobek jest bez wątpienia solidny, zwarty tematycznie i wpisuje się w dobrze zakreślony i silnie powiązany z eksperymentem temat badawczy. Wyniki zostały opublikowane w porządnym czasopiśmie branżowych typowych dla dziedziny inżynierii materiałowej (*Acta Mater.*, *J. Phase Equil. Diff.*), chemii fizycznej (*PCCP*) i fizyki (*PRB*, *PRM*, *J. Phys.: Cond. Matter*), nauk obliczeniowych (*Comput. Mater. Sci.*), czasopiśmie interdyscyplinarnych typu open access (*Sci. Rep.*), a także (jedna) w prestiżowym czasopiśmie interdyscyplinarnym głównego nurtu (*Science Adv.*).

Warto przyrzeć się także całości dorobku naukowego dr. Wróbla. Doktorat p. Wróbel obronił w 2012 r., zatem ponad dekadę temu. Dr Wrobel publikuje od zakończenia doktoratu średnio trzy prace rocznie, co uznaję za wynik umiarkowany czy **przeciętny**. Jednak cytowania obce są od dekady na krzywej zdecydowanie wznoszącej. Baza danych Scopus (akces 1.02. 2023 r.) wymienia łącznie czterdzieści dwie publikacje Jego współautorstwa (H=18), gromadzące łącznie niemal 1000 cyt. obcych; wyróżnia się jedna praca znacząca (tzn. mająca ponad 100 cyt. obcych) z 2019 r. mająca 232 cyt. obcych. To w skali krajowej **bardzo dobry** wynik zważywszy także na etap kariery naukowej dr. Wróbla; po części wynika on na pewno z możliwości współpracy z dobrymi grupami teoretycznymi począwszy od tej, z której wyrósł (Kurzydłowski), po te, z którymi mógł współpracować na dalszym etapie kariery. Szkoda, że we wzmiankowanej publikacji dr Wróbel nie był ani pierwszym, ani korespondencyjnym autorem. Jednak jest to naturalne, gdyż praca ta jest w zasadniczej mierze eksperymentalna, a dr. Wróbla miał wkład wyłącznie we wspomagającą (obliczeniową) część pracy. Nie można doszukać się w owej pracy żadnej sugestii, by to wyniki teoretyczne profetycznie poprzedzały wyniki eksperymentalne (wówczas rola teorii byłaby wiodąca). W podsumowaniu rzecz należy, iż Dr Wróbel opublikował znaczną liczbę prac w większości wieloautorskich, ze swoją wiodącą lub co najmniej równorzędną do „senior authors” rolą, mając wkład do części obliczeniowej, przy czym część z prac została bardzo dobrze przyjęta przez środowisko naukowe.

Przejdę do meritum sprawy, czyli do kwestii naukowych powiązanych z ocenianym osiągnięciem. Głównym osiągnięciem habilitanta wydaje się być zrozumienie natury (struktury lokalnej, właściwości) stopów wielopierwiastkowych tak lekkich metali przejściowych (głównie 3d, np. Fe-Cr-Mn-Ni), jak i ciężkich (np. W-Re-Os), oraz stopów metali obu tych grup (np. Cr-Ta-Ti-V-W). Wyniki teoretyczne pozwoliły zrozumieć m.in. dlaczego w materiale poniżej pewnej temperatury pojawiają się wytrącenia wzbogacone w jeden lub dwa pierwiastki składowe (tendencja segregacyjna). Ponadto, Habilitant upatruje przyczynę

olbrzymiej obserwowanej w eksperymencie odporności wybranych stopów na napromieniowanie w złożonej plazmie w tym, iż mobilności dwóch typów defektów, t.j. wakansów oraz adatomów międzywęzłowych są podobne, co skutkuje możliwością „zaleczania” sklastrowania się defektów (klastrowanie mogłoby doprowadzić do powstawania mikroskopowych wad materiału). Takie zachowanie stopów wielokomponentowych pozostaje w olbrzymim kontraście z niekorzystnym zachowaniem np. czystego wolframu, który jest stosowany w diwertorach reaktorów jądrowych. O ile pierwszy wynik teoretyczny nie jest szczególnie odkrywczy, gdyż entalpię mieszania głównie w stopach dwukomponentowych i tendencję do separacji fazowej wyznaczano już dość dawno, o tyle zauważyć należy, że symulacje prowadzone przez Habilitanta były technicznie nietrywialne, ze względu na złożony skład stopów (np. $W_{38}Ta_{36}Cr_{15}V_{11}$) i wynikającą z tego konieczność użycia wielu bardzo dużych superkomórek kryształu do symulacji materiału wykazującego symetrię translacyjną. Z kolei wynik związane z możliwością anihilacji dwóch typów defektów nie jest wynikiem twardo popartym obliczeniami mobilności, lecz sugestią typu „*educated guess*”. Przyznać przy tym należy, że obliczenia takie dla wzmiankowanego $W_{38}Ta_{36}Cr_{15}V_{11}$ byłyby bardzo kosztowne, o ile w ogóle wykonalne z użyciem metod *ab initio*, nie mówiąc już o tym, że dla stopów złożonych z metali 3d sprawę dodatkowo komplikuje ich magnetyzm. Wreszcie, wyjście poza układy dwuskładnikowe wymagało modyfikacji oprogramowania i użycia nowych narzędzi analitycznych, co Habilitant stosownie uczynił. W podsumowaniu należy więc stwierdzić, że to nie nowe górnoletne koncepcje teoretyczne, lecz ciężka praca u podstaw, mozolny rozwój narzędzi i metodologii, pozwoliły dr. Wroblowi osiągnąć zaplanowane cele. Skutkiem pracowitości i dokładności są m.in. takie ciekawe konkluzje jak ta, że objętość stopów Fe-Cr-Ni nie stosuje się do zasady Vegarda lecz może być anomalna (dodatek chromu o „dużym” promieniu atomowym skutkuje spadkiem objętości) i jest silnie powiązana z właściwościami magnetycznymi każdego z tych atomów. Uważam ten wynik za ciekawy i ważny, tym bardziej że dotyczy stali o olbrzymim spektrum zastosowań. Innym ciekawym wynikiem (choć za koncepcję badawczą, jak pisze *explicite* Habilitant,

odpowiedzialny jest także prof. K. Kurzydłowski) jest model powstawania wydzielen bogatych w Re w stopach W-Re. Model ten, potwierdzony obliczeniami, zakłada kluczową rolę wakansów w powstawaniu wydzielen. Mam tu uwagę natury chemicznej mogącą rzutować na konsekwencje dla inżynierii materiałowej. Tworzenie stopów przez pierwiastki z tej samej grupy Układu Okresowego o dużych i elektronowo miękkich (w sensie Pearsona) atomach (np. W-Mo czy Zr-Hf) nie jest niczym nieoczekiwanym a negatywne konsekwencje tego zjawiska dla geologii i oczyszczania rud są gigantyczne. Z drugiej strony, w przypadku tworzenia stopów przez pierwiastki z tego samego okresu, ale różnych grup Układu Okresowego (np. wzmiankowany tu W-Re) można zrozumieć, zakładając przynajmniej częściową lokalizację nadmiarowej gęstości elektronowej. W tym konkretnym przypadku, zauważając izoelektronowość atomu W^0 i zrębu Re^+ o nieznacznie tylko mniejszym promieniu, i naginając stosowalność reguły Zintl-Klemm do metali, stop $W_{1-x}Re_x$ moglibyśmy przybliżyć jako $W_{1-x}Re^+_x e^-_x$. Potencjalne wakanse struktury byłyby idealnym miejscem na przynajmniej częściowe lokalizowanie się „nadmiarowej” gęstości elektronowej wprowadzanej przez Re. Układy takie, o bardzo silnej lokalizacji znane są w chemii od około czterdziestu lat i nazywane są elektrydami lub elektrydkami. Czasami nawet brak defektów (szczególnie w podsieci anionowej) nie przeszkadza w ich powstawaniu, np. pierwiastkowy sód pod wysokim ciśnieniem zamienia się w bezbarwny izolator elektryczności, Na^+e^- . Opis Habilitanta zachowania stopu $W_{1-x}Re_x$ wyposażonego w wakansy, które stają się rodzajem quasi-atomu, stabilizowanego przez kationy Re^+ wokół, niezwykle silnie przypomina oczekiwane zachowanie elektrydów.

Druga sugestia, jaką chciałbym tu poczynić, jest możliwość użycia przez Habilitanta tak prostego parametru jak „średnia liczba elektronów walencyjnych na atom stopu”, czyli tzw. *electron count*. Jest to parametr powszechnie używany w chemii ciała stałego m.in. do opisu stabilności form polimorficznych (np. fcc vs. bcc) w funkcji składu.

Warto przy tej okazji zauważyć, że Natura „wymyśliła” związki wielokomponentowe czy roztwory stałe miliardy lat temu. Przykładowo, minerał *johnsenit* występujący m.in. w prowincji Quebec w Kanadzie, przyjmuje pozornie prostą strukturę krystaliczną, o komórce $R3m$ ($Z=3$). Jednak de facto miast prostego oczekiwanego wzoru chemicznego znajdujemy w nim pięć niemetalu (Si, C, Cl, O i H) oraz siedemnaście metali. Ponieważ wiele kationów o dość różnych promieniach jonowych zajmuje z konieczności tą samą pozycję w strukturze krystalicznej, prowadzi to z pewnością do lokalnego nieporządku w strukturze, blisko- i daleko-zasięgowych deformacji, występowania wakansów balansujących lokalne pole elektryczne, tzw. *rattlingu* kationów mniejszych (typowego właśnie dla materiałów o wysokiej entropii), a być może nawet trudno wykrywalnych modulacji struktury. Także na pozycji anionowej występuje tu znaczny nieporządek. Wpół-rekordzistą jest minerał *hellandit*, o jednoskośnej komórce zawierającej jeden ekwiwalent wzoru strukturalnego opartego o 22 różne pierwiastki chemiczne, gdzie także współwystępuje 17 metali i 5 niemetalu o walencyjnościach od 1+ do 4+ i dramatycznie różnych promieniach jonowych. We współczesnej nauce związki o wysokiej entropii stały się modne od ukazania się pracy J.-W. Yeh i wsp. w *Advanced Engineering Materials* w 2004 r. Bardzo szybko zdano sobie sprawę z różnorodności ich potencjalnych zastosowań, w tym z możliwej przewagi nad tradycyjnymi materiałami uporządkowanymi i amorficznymi; równocześnie obszar badań, pierwotnie ograniczony do stopów, poszerzył się na związki chemiczne, szczególnie tlenki.

Ocena dorobku naukowego dr. Wróbla nie może abstrahować od innych elementów, nie będących bezpośrednią składową omówionego już osiągnięcia. Dr Wróbel czyni wysiłki w celu pozyskania środków na badania naukowe w formie grantów, zdobywanych w procedurach konkursowych; zakończyło się to sukcesem w przypadku projektów Homing i Sonata, na obecnym etapie kariery oczekiwany byłby projekt typu OPUS. Umiejętność nawiązywania przez dr. Wróbla wartościowej współpracy naukowej również nie podlega dyskusji; cieszy także przyznanie projektu europejskiego INNUMAT, w którym dr Wróbel jest

PI po stronie Politechniki Warszawskiej; świadczy to o dojrzałości Habilitanta. Dodatkowym elementem poświadczającym Jego aktywność „grantobiorczą” jest projekt wewnętrzny (w ramach Politechniki Warszawskiej) t.j. IDUB. Zaangażowanie w dydaktykę młodzieży jest może nieco poniżej przeciętnej, lecz ma się to szanse zmienić (deklaratywny opiekun pomocniczy trzech prac doktorskich, wg. bazy Synaba nadal trwających tzn. jeszcze nie zakończonych obroną). Co do upowszechniania wyników naukowych: ustne wystąpienia konferencyjne lub wykłady w ośrodkach naukowych w kraju i za granicą są rozsądnie liczne a niektóre były wygłoszone na zaproszenie organizatorów. Podobają mi się plany badawcze Habilitanta, w szczególności plan stworzenia dokładnych potencjałów międzycząsteczkowych dla wybranych stopów. W zasadzie jest to kluczowy element metodologii, która może urealnić badania np. mobilności wakacji bez konieczności użycia zbyt kosztownych metod *ab initio*. Bardzo napawa mnie optymizmem mnie także Jego narastające zaangażowanie w eksperyment.

W podsumowaniu, mimo bardzo drobnych zastrzeżeń, moja ocena dorobku dr. Wróbla jest jednoznacznie pozytywna. Uzyskane przez niego wyniki są wartościowe i ważne; dotyczą bardzo ważnych i faktycznie stosowanych na dużą skalę materiałów i wpisują się w modny nurt studiów nad materiałami o wysokiej entropii. Drobne opisane wyżej niedociągnięcia nie podważają sedna sprawy. W mojej opinii dr Wróbel jest dojrzałym naukowcem, który powinien uzyskać prawo samodzielnego promowania doktorów. Uważam, że przedstawione osiągnięcia całkowicie spełniają wymagania stawiane w Ustawie kandydatom na doktora habilitowanego i należy dopuścić aplikanta do dalszych etapów postępowania.



Prof. Wojciech Grochala

