

Imię i nazwisko recenzenta:

28.04.2025, Katowice

Dr hab. inż. Grzegorz MOSKAL, Prof. PŚ

Dane adresowe:

Politechnika Śląska

Wydział Inżynierii Materiałowej

Laboratorium Innowacji Materiałowych

40-019 Katowice, ul. Krasińskiego 8

Recenzja pracy doktorskiej

Mgr inż. Damiana Sobieraja

pod tytułem:

„Phase stability and short-range ordering of W-based SMART materials and high-entropy alloys predicted from the first-principles modelling”

przygotowanej pod kierunkiem:

Dr hab. inż. Jana S. Wróbla

1. Podstawa opracowania

Recenzja została wykonana na zlecenie Rady Dyscypliny Inżynieria Materiałowa Politechniki Warszawskiej.

Podstawa prawna art. 187 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce” (z późn. zm.)

Opinia dotycząca przedmiotowej rozprawy doktorskiej zawiera trzy elementy:

- 1) Ocenę wraz z uzasadnieniem czy rozprawa doktorska prezentuje ogólną wiedzę teoretyczną Doktoranta w dyscyplinie inżynieria materiałowa;
- 2) Ocenę wraz z uzasadnieniem czy rozprawa doktorska wykazuje umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej przez Doktoranta ubiegającego się o nadanie stopnia doktora;
- 3) Ocenę wraz z uzasadnieniem czy rozprawa doktorska stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego.

2. Charakterystyka i opis rozprawy

Przedstawiona do oceny dysertacja doktorska Pana mgr inż. Damiana SOBIERAJA, wskazuje, iż jej Autor **posiada niezbędną wiedzę teoretyczną** predestynującą Go do ubiegania się o stopień doktora nauk inżynieryjno-technicznych w dyscyplinie inżynieria materiałowa. Wiedza ta jest na bardzo wysokim poziomie merytorycznym, łącząc w sobie zagadnienia typowe dla inżynierii materiałowej oraz fizyki.

Uzasadnienie:

Mgr inż. Damian SOBIERAJA, w swej pracy przedstawił zagadnienie stabilności fazowej oraz uporządkowania bliskiego zasięgu w odniesieniu do materiałów wysokoentropowych na bazie wolframu w tym typu SMART. Użył do tego metod modelowania na bazie tzw. pierwszych

zasad (metody ab initio oparte na teorii funkcjonału gęstości). Prezentowane wyniki były realizowane w ramach kilku projektów tj. projektu HOMING zatytułowanego "Modelowanie ab-initio stabilności fazowej i właściwości stopów o wysokiej entropii", projektu H2020 "Implementation of activities described in the Roadmap to Fusion during Horizon 2020 through a Joint programme of the members of the EUROfusion consortium" oraz projektu NCN „Ewolucja mikrostruktury w stopach o wysokiej entropii Ta-Ti-V-W: od symulacji ab initio do technologii druku 3D”. Praca została sporządzona w języku angielskim w formule cyklu czterech publikacji.

W ramach przedstawionej do oceny dysertacji doktorskiej przedstawiono wyniki badań w zakresie oceny stabilności fazowej oraz uporządkowania bliskiego zasięgu stopów o wysokiej entropii z układu W-Cr-Ta-Ti-V, oraz samopasywujących się materiałów określanych jako SMART z układu W-Cr-Y-Zr. Celem tych badań było m. in. określenie potencjału aplikacyjnego charakteryzowanych kompozycji materiałowych z punktu widzenia wymagań stawianych materiałom konstrukcyjnym dedykowanym energetyce jądrowej, a konkretnie reaktorom fuzyjnym. Z metodologicznego punktu widzenia, zastosowano modelowanie oparte na Teorii Funkcjonału Gęstości, metodzie Rozwinięcia Klastrowego i symulacjach Monte Carlo (MC). Celem procesu modelowania było określenie roli pierwiastków stopowych w mechanizmach tworzenia się roztworów stałych oraz struktur bliskiego uporządkowania. Parametrami zmiennymi w tych badaniach był rodzaj pierwiastka stopowego oraz jego stężenie.

Podstawą doboru stopów na bazie wolframu, jako materiału poddanego analizom, są ich pożądane właściwości eksploatacyjne w środowisku pracy, tak skrajnym jak w przypadku procesów syntezy jądrowej, gdzie głównym czynnikiem destrukcyjnym jest strumień energii cieplnej oraz promieniowanie neutronowe. Jednakże, właściwości użytkowe tych materiałów wymagają poprawy, zwłaszcza z punktu widzenia podatności na uszkodzenia radiacyjne różnego typu.

Bardzo atrakcyjnym obszarem materiałowym, wydają się być stopy wysokoentropowe, w tym stopy na bazie pierwiastków metali wysokotopliwych, które w porównaniu do konwencjonalnych stopów wysokoentropowych, charakteryzują się mniejszym przekrojem czynnym, co powoduje większą odporność na uszkodzenia radiacyjne.

Jak wspomniano, prezentowana praca ma charakter cyklu 4 publikacji w następujących czasopismach naukowych tj.:

- Physical Chemistry Chemical Physics – IF – 3,676 i 100 pkt MNiSW;
- Science Advances – IF – 11,700 i 200 pkt MNiSW;
- Metals – IF – 2,6 i 100 pkt MNiSW;
- Journal of Alloys and Metallurgical Systems – brak indeksów.

Zaskakujący jest tu rozrzut jakościowy czasopism, w których Doktorant publikował swoje prace.

Tzw. przewodnik po publikacjach zawiera część teoretyczną (Introduction), w której mgr inż. D. SOBIERAJ przedstawił podstawy teoretyczne prezentowanych badań. Rozdział ten jest stosunkowo krótki, jednakże wystarczający z punktu widzenia wprowadzenia do zagadnienia. Doktorant skupia się na opisie materiałów o wysokiej entropii i ich właściwościach istotnych

z punktu widzenia planowanych zastosowań konstrukcyjnych, jako elementów reaktorów fuzyjnych.

Jednakże przegląd literatury budzi pewien niedosyt. Nie przedstawiono bowiem, szerszego kontekstu wymagań stawianych materiałom dedykowanym energetyce jądrowej, co w sposób jednoznaczny wskazywałby na stabilność składu fazowego i uporządkowanie struktury, jako głównego czynnika decydującego o potencjale aplikacyjnym badanych materiałów. W tym kontekście, badania nad wieloskładnikowymi stopami wysokoentropowymi na bazie wolframu, zdolnymi do tworzenia pożądanej struktury sieciowej bcc, byłyby w pełni wyjaśnione. Brak jest również informacji na temat konkretnych wymagań stawianych badanym materiałom, z punktu widzenia planowanego zastosowania. Czy są to materiały przeznaczone do ekranowania promieniowania wysokoenergetycznego (co jest najnowszym kierunkiem badań stopów wysokoentropowych), czy też przewidywane są inne zastosowania?

Z prezentowanego przeglądu literaturowego wynika, że Doktorant bada dwie grupy materiałów tj. wysokoentropowe stopy na bazie wolframu (prawdopodobnie z potencjalnym przeznaczeniem jako osłony radiacyjne), oraz grupę materiałów o zdolnościach do samopasywacji dedykowanych zabezpieczeniom związanych z potencjalnymi awariami w wyniku utraty chłodziwa. **Jak wspomniano, brakuje jednoznacznego określenia wymagań stawianych tym materiałom i wyjaśnienia zależności pomiędzy stabilnością składu fazowego oraz uporządkowaniem bliskiego zasięgu, a oczekiwanymi właściwościami użytkowymi.**

Literatura, będąca podstawą przeprowadzonych analiz jest aktualna i generalnie poprawnie dobrana z punktu widzenia omawianych zagadnień. Aczkolwiek, Doktorant zastosował cytowania „zbiorowe” tj. wiele pozycji źródłowych odniesionych w stosunku do niewielkiej porcji informacji.

Przegląd literatury był podstawą określenia hipotezy badawczej, która generalnie sprowadza się do stwierdzenia, że stabilność fazowa oraz uporządkowanie bliskiego zasięgu może być prognozowane zaawansowanymi metodami symulacyjnymi bazującymi na pierwszych założeniach.

Jest to oczywiście racja, lecz brakuje kontynuacji tej myśli związanej z predykcją pożądanych cech użytkowych tj. tolerancją radiacyjną, zdolnością do emisji promieniowania wtórnego, czy skłonnością do utwardzania indukowanego promieniowaniem itp.

Odrębnym zagadnieniem są kompetencje Doktoranta w obszarze tzw. obliczeniowej inżynierii materiałowej, bazującej na metodach typu DFT, Cluster Expansion oraz Monte Carlo. Wiedza prezentowana w tym zakresie przez doktoranta jest bezdyskusyjna, co samo w sobie nie jest zaskakujące biorąc pod uwagę osobę Promotora tj. dr hab. inż. Jana Wróbla.

Kolejna część oceny dotyczy kwestii **umiejętności samodzielnego prowadzenia pracy naukowej przez Doktoranta**, ubiegającego się o nadanie stopnia doktora nauk inżyneryjno-technicznych w dyscyplinie inżynieria materiałowa. Analiza tego elementu wskazuje jednoznacznie, że mgr inż. Damian SOBIERAJ posiada konieczną wiedzę

teoretyczną dotyczącą metod symulacji bazujących na tzw. pierwszych zasadach. Potrafi wykorzystać tę wiedzę, dostosowując metodykę badań do specyficznych analiz związanych z oceną strukturalną badanych stopów. Ponadto wyniki swoich badań potrafi umiejętnie przedstawić w publikacjach naukowych, prawidłowo je interpretując. **Pewien niedosyt można odczuć w przypadku wniosków, zarówno w publikacjach jak i w tzw. przewodniku. W prezentowanej formie nie dają one odpowiedzi na pytanie, jaka powinna być optymalna, z punktu widzenia oczekiwanych właściwości użytkowych, kompozycja składu chemicznego materiałów w przypadku stopów HEA oraz SMART.**

Uzasadnienie:

Zaproponowany przez Doktoranta zakres badań teoretycznych, bazuje na symulacjach metodami *ab initio*. Sama metodyka badań jest niezwykle zaawansowanym narzędziem, służącym m.in. predykcji właściwości materiałów inżynierskich, w tym w tak agresywnych środowiskach jak reaktory fuzyjne. Fachowa wiedza w tym obszarze, pozwoliła Doktorantowi na swobodne prowadzenie symulacji oraz zrozumienie uzyskanych wyników i ich interpretację. Postawiony problem badawczy jest jednoznaczny i prawidłowo opisany (poza wspomnianymi wcześniej słabościami dotyczącymi korelacji pomiędzy stabilnością fazową oraz uporządkowaniem bliskiego zasięgu a oczekiwanymi właściwościami). Uzyskane wyniki obrazują cały zestaw zależności strukturalnych mających miejsce w analizowanych układach składników stopowych. Opisując stabilność układów dwu- i wielo-składnikowych oraz wskazują na prawdopodobny przebieg procesów przemiany porządek-nieporządek oraz segregacji i tworzenia faz wtórnych (międzymetalicznych). Informacje, które udało się uzyskać Doktorantowi, stanowią podstawę do projektowania składów chemicznych materiałów konstrukcyjnych o wysokiej entropii, dedykowanych zastosowaniom jądrowym. Część z symulacji została potwierdzona badaniami eksperymentalnymi, zwłaszcza w zakresie stabilności stopów HEA.

Ostatnią część oceny stanowi kwestia **oryginalności rozwiązania problemu naukowego**. Nie ma wątpliwości co do tego faktu. Przedstawiona dysertacja doktorska w pełni wpisuje się w obszar dyscypliny inżynieria materiałowa, a także w zakres zagadnień fizyki ciała stałego. Zaproponowana metodyka badań jest bardzo zaawansowana, a prezentowane wyniki wskazują na dużą swobodę Doktoranta w poruszaniu się w tym obszarze. Zaproponowane przez D. SOBIERAJA podejście do predykcji zjawisk strukturalnych wskazuje także na umiejętne połączenie wiedzy na poziomie zjawisk atomowych z makroskopowymi cechami projektowanych materiałów, aczkolwiek można dopatrzeć się tutaj pewnych słabości. Wiedza przedstawiona przez Doktoranta, stanowi bardzo duży wkład w rozwój dyscypliny inżynieria materiałowa, nie tylko ze względu na zastosowaną metodykę badań, ale również z punktu widzenia badanych materiałów. Są one w tej chwili obiektem bardzo szerokich i zaawansowanych badań, nie tylko jako materiały o wyjątkowych właściwościach mechanicznych, ale także z powodu ich potencjalnie ogromnego obszaru aplikacyjnego w skrajnie agresywnych środowiska roboczych.

3. Uwagi dyskusyjne

- W pracy odnoszono się jedynie do wymagań stawianych materiałom o potencjalnym zastosowaniu w reaktorach fuzyjnych, czy wyniki uzyskanych analiz mogą posłużyć również do projektowania materiałów w reaktorach rozszczepieniowych?

- Czy w przedstawionych symulacjach możliwe jest uwzględnienie zjawisk niestabilności fazowej i przemiany porządek-nieporządek indukowanych promieniowaniem wysokoenergetycznym?

- Jakie potencjalne zastosowanie przewiduje Doktorant dla opracowanych przez siebie materiałów?

- Jakie praktyczne wnioski można wynikać z przedstawionych analiz, które można wykorzystać w procesie projektowania materiałów o wysokiej entropii, dedykowanych zastosowaniom „jądrowym”?

- Czy analizie poddano tendencję tych materiałów do emisji promieniowania wtórnego?

4. Wniosek końcowy

Podsumowując stwierdzam, że recenzowana rozprawa spełnia wymagania określone w art. 187 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (z późn.zm.) i wnioskuję o jej dopuszczenie do dalszych etapów postępowania o nadanie stopnia doktora w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych w dyscyplinie inżynieria materiałowa.


.....
(podpis recenzenta)