

RECENZJA

dorobku naukowego dr inż. Jana Wróbla dotycząca Jego wniosku o nadanie stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych, dyscyplina inżynieria materiałowa.

Podstawa prawna: Ustawa Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20 lipca 2018 z późniejszymi zmianami (Dz. U. 2018 poz. 1668), decyzja Rady Naukowej Dyscypliny Inżynieria Materiałowa Politechniki Warszawskiej z dn. 16.01.2023.

Recenzja została przygotowana na podstawie dokumentów przygotowanych przez Kandydata, a mianowicie:

- (1) wniosku przewodniego,
- (2) danych wnioskodawcy,
- (3) autoreferatu,
- (4) kopii dyplomów i potwierdzenia zatrudnienia w UKAEA,
- (5) oświadczenia współautorów,
- (6) pakietu 11 publikacji oraz
- (7) ogólnodostępnych danych bibliograficznych i informacji publicznych.

1. Życiorys naukowy Kandydata

Pan doktor inżynier Jan Wróbel otrzymał tytuł magistra inżyniera na Wydziale Fizyki Politechniki Warszawskiej w roku 2007 na podstawie pracy „Modelowanie własności strukturalnych ZnO z pierwszych zasad”, a stopień naukowy doktora nauk technicznych na Wydziale Inżynierii Materiałowej Politechniki Warszawskiej w roku 2012 na podstawie

rozprawy „Modelowanie ab-initio właściwości faz międzymetalicznych La-X (X=Mg, Al)”. Po ukończeniu studiów pracował kolejno w Interdyscyplinarnym Centrum Modelowania Komputerowego i Matematycznego UW, Culham Centre for Fusion Energy (Wlk. Brytania) i od 2015 roku jest zatrudniony na Wydziale Inżynierii Materiałowej Politechniki Warszawskiej, obecnie na stanowisku adiunkta. W roku 2020 był również dodatkowo zatrudniony na Uniwersytecie Kardynała Stefana Wyszyńskiego Centrum Cyfrowej Nauki i Technologii. Zarówno obecne miejsce zatrudnienia Kandydata jak również jego życiorys zawodowy jest zgodny z profilem oczekiwanym od kandydata do uzyskania stopnia naukowego w dziedzinie nauk technicznych, dyscyplina inżynieria materiałowa.

2. Ocena dorobku i osiągnięć naukowych

Działalność naukowa Kandydata jest od początku ukierunkowana na modelowanie właściwości strukturalnych metali, ze szczególnym uwzględnieniem materiałów przewidzianych do użycia w technologiach jądrowych, zarówno fuzyjnych jak i wykorzystujących rozszczepienie jąder uranu. Kandydat w swoich badaniach naukowych wykorzystuje zaawansowane metody obliczeniowe takie jak: ab-initio, density functional theory – DFT, cluster expansion (CE), symulacje Monte Carlo (MC) czy metoda structure inversion method - SIM. Zagadnienia, jakimi zajmuje się Kandydat, w tym modelowanie stabilności fazowej wieloskładnikowych stopów metali, stanowią obecnie przedmiot intensywnych prac naukowych na świecie, udział Kandydata w tych pracach jest zarówno znaczący, jak też świadczy o ambitnym i przyszłościowym wyborze tematyki naukowej. Patrząc na działalność Kandydata z szerszej perspektywy chciałbym podkreślić, iż analiza właściwości materiałów bazująca na wykorzystaniu holistycznego podejścia łączącego symulacje komputerowe w szerokim zakresie skali wymiarowych i czasowych z rygorystycznie prowadzoną walidacją eksperymentalną jest niewątpliwie przyszłością badań materiałowych. Prace takie prowadzone są w wielu wiodących ośrodkach naukowych na świecie a ich ostatecznym celem jest zdobycie „Świętego Graala” nauk o materiałach: umiejętności przewidywania właściwości materiałów w długim okresie czasu i w różnych warunkach eksploatacyjnych.

Do szczególnie cennych osiągnięć Kandydata stanowiących Jego dorobek przedstawiony do oceny w ramach dokumentacji procesu habilitacyjnego chciałbym zaliczyć obliczenia DFT dla struktur wieloskładnikowych jak Fe-Cr-Ni, wyznaczanie entropii konfiguracyjnej na podstawie fluktuacji entalpii mieszania czy uwzględnienie w obliczeniach oddziaływań magnetycznych. Chciałbym też mocno podkreślić fakt, że Kandydat w swoich pracach nie ogranicza się do używania jednej, wąsko zdefiniowanej metody, ale stosuje cały ich wachlarz, dobierając metody odpowiednie do rozwiązania konkretnego problemu a nie, jak czasem się to zdarza, dobierając problem do opanowanej przez siebie jednej metody. Podejście to, jak świadczą o tym publikacje z ośrodkiem w Culham, zostało docenione w środowisku międzynarodowym, czego dowodem są prace Kandydata nad modelowaniem właściwości

stopów o wysokiej entropii W-Ta-V-Mo-Nb, gdzie zastosowanie jego modelu DFT+CE+MC pozwoliło na zbadanie uporządkowania atomowego w funkcji temperatury.

Kolejnym, wartym wyróżnienia, fragmentem prac Kandydata są jego prace nad modelowaniem struktur defektów punktowych w materiałach Fe-Cr-Ni. Nie będąc specjalistą w zakresie mechaniki ośrodków ciągłych trudno mi ocenić wyniki dotyczące obliczeń dotyczących tensora dipola sprężystego lub tensora objętości relaksacji wakansów, nie mam jednak wątpliwości, że modelowanie oddziaływania defektów punktowych z defektami złożonymi jest istotnym zagadnieniem, niezbędnym do zrozumienia wczesnych etapów akumulacji defektów radiacyjnych w materiałach. Problem ten jest bardzo istotnym zagadnieniem przy przewidywaniu ewolucji właściwości materiałów pod wpływem promieniowania i jest bardzo trudny do analizy eksperymentalnej, głównie ze względu na bardzo małe rozmiary badanych struktur (zwykle rzędu pojedynczych nanometrów) i fakt, że struktury te tworzone są w bardzo krótkich okresach czasu. Typowy okres trwania kaskady wybiciowej to 10 do 100 pikosekund. W tym czasie można wyróżnić kilka etapów: fazę wybiciową, saturację i wreszcie termalizację kaskady w trakcie której anihilacji podlega ogromna większość wytworzonych defektów. Obecnie brak metod eksperymentalnych pozwalających na rejestrowanie struktury materiału w tak krótkich czasach, w przyszłości może będzie to możliwe z wykorzystaniem laserów na swobodnych elektronach. Końcowa struktura defektowa po zakończeniu ewolucji kaskady nadal podlega zmianom w wyniku termicznej migracji atomów i defektów. Wszelkie dane eksperymentalne pochodzą więc z pomiarów wykonywanych po zakończeniu ewolucji kaskady, a wpływają na nie także procesy termicznej migracji. Oczywiście jest więc, że obecnie jedynymi metodami pozwalającymi na opis zjawisk zachodzących w kaskadzie są symulacje komputerowe. Należy pamiętać, że opis tych zjawisk jest niezbędny do predykcji wczesnych etapów tworzenia struktur defektowych, a w konsekwencji stanu wyjściowego podlegającego ewolucji w dłuższym czasie po wytworzeniu defektu. Badania te mają istotne znaczenie praktyczne, są bowiem koniecznym elementem dla opracowania modeli pozwalających na przewidywanie własności funkcjonalnych materiałów w trakcie sięgającej nawet 100 lat eksploatacji reaktorów III generacji.

Istotnym czynnikiem w ocenie działalności Kandydata, jaki brałem pod uwagę jest również Jego ocena przez międzynarodowe środowisko naukowe. Fakt licznych, trwałych i zróżnicowanych kontaktów naukowych z najlepszymi ośrodkami na świecie jak Culham Centre for Fusion Energy w Wielkiej Brytanii, Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives we Francji, Forschungszentrum Jülich GmbH, Niemcy, Los Alamos National Laboratory, USA czy KTH Royal Institute of Technology, Szwecja jest mocnym potwierdzeniem faktu, iż Kandydat ma już ugruntowaną i zasłużoną pozycję w środowisku międzynarodowym. Pozostaje mi tylko życzyć Mu, aby dalszy ciąg Jego kariery naukowej był równie szybki i imponujący.

Tradycyjną rolą recenzenta jest oczywiście sugerowanie Kandydatowi pewnych uchybień znalezionych w pracach i ich opisach aby pomóc Mu w dalszym rozwoju i przygotowania kolejnych opracowań na coraz wyższym poziomie. Z konieczności zatem chciałbym zwrócić uwagę pewne drobne niedoskonałości. Jedną z nich jest tytuł osiągnięcia naukowego:

„BADANIE PRZY UŻYCIU METOD AB INITIO STABILNOŚCI FAZOWEJ ORAZ WŁAŚCIWOŚCI WIELOSKŁADNIKOWYCH STOPÓW METALI DO ZASTOSOWAŃ W REAKTORACH SYNTEZY TERMOJĄDROWEJ”. Wydaje się, iż ze względów czysto logicznych, temat powinien raczej wskazywać na wyniki badań, a nie na sam fakt ich przeprowadzenia. Praca zawiera ponadto znacznie więcej metod analizy niż tylko ab-initio, co może warto podkreślić już na etapie formułowania tytułu opracowania. Kandydat konsekwentnie stosuje w opisie polską terminologię, co jest oczywiście słuszne i uzasadnione. Tym niemniej, biorąc pod uwagę powszechność terminów angielskojęzycznych dobrze jest powiązać terminy polskie z angielskimi. Przypadkiem, w którym takiego powiązania mi zabrakło jest termin „puchnięcie”, jak rozumiem chodzi o „swelling”, osoby mniej związane z technologiami jądrowymi mogą mieć jednak pewne kłopoty ze zrozumieniem tego terminu.

3. Ocena aktywności naukowej

Łączny dorobek naukowy Kandydata stanowi 39 publikacji w recenzowanych czasopismach o zasięgu międzynarodowym, z czego przed uzyskaniem stopnia doktora 8 prac, a po uzyskaniu stopnia doktora 31. Sumaryczny Impact Factor wynosi 120.377, łączna liczba cytowań 940, a indeks Hirscha 16. Są to bardzo dobre wyniki, zdecydowanie powyżej przeciętnej dla kandydatów do stopnia doktora habilitowanego nauk technicznych. Ma również imponującą skuteczność w pozyskiwaniu finansowanych projektów naukowych, co jest niewątpliwie konieczną umiejętnością osoby na stanowisku samodzielnego pracownika naukowego. Pozyskał i kierował projektem HOMING, obecnie kieruje uzyskanym przez siebie projektem SONATA, jest jednym z wykonawców europejskiego projektu INNUMAT. Uczestniczył również w pracach konsorcjum EuroFUSION. Odbił kilka staży zagranicznych, w tym 2.5 letni pobyt typu post-doc w Culham. Mając sporo kontaktów w międzynarodowym środowisku naukowym osób zajmujących się tematyką materiałów do zastosowań jądrowych wiem z rozmów w różnych ośrodkach, że dr Wróbel jest już znany i rozpoznawalny w tym środowisku. Również pod tymi względami Kandydat wyraźnie przekracza niezbędne wymogi dla osób aspirujących do stopnia doktora habilitowanego.

4. Ocena osiągnięć dydaktycznych i popularyzatorskich

Pan doktor Jan Wróbel ma także doświadczenie w działalności dydaktycznej, niezbędne dla osoby na stanowisku samodzielnego pracownika naukowego. Był promotorem pomocniczym w trzech przewodach doktorskich, opiekunem naukowym dwóch prac magisterskich i konsultantem w pracy inżynierskiej. Uczestniczył też w pracach, w które zaangażowany był doktorant w CCFE (UK). Był opiekunem stażysty z Francji w czasie jego pobytu w Polsce. Prowadził też zajęcia dla studentów, a konkretnie laboratoria komputerowe dotyczące metody ab-initio. Wszystkie te doświadczenia niewątpliwie dowodzą, że po uzyskaniu stopnia

naukowego doktora habilitowanego Kandydat będzie zdolny do skutecznego i samodzielnego prowadzenia doktoratów, logicznego następnego kroku w Jego karierze naukowej.

5. Podsumowanie

Muszę przyznać, że z dużą przyjemnością zaznajomiłem się z przedstawionymi do oceny dokumentami. Rzadko zdarza się tak dobrze udokumentowany i przekonujący wniosek o nadanie stopnia doktora habilitowanego. Zarówno poziom prac przedstawionych przez Kandydata jak również jego dorobek naukowy, skuteczność w pozyskiwaniu grantów, doświadczenie dydaktyczne, kontakty w środowisku międzynarodowym a także sposób przedstawienia autoreferatu, czytelny, logiczny i starannie przygotowany, są na bardzo dobrym światowym poziomie. Miałem okazję recenzować dwie habilitacje (HDR) we Francji na dobrym uniwersytecie (Paris XI w Orsay), muszę przyznać, że Kandydat przewyższa obu habilitantów z Orsay.

Z pełnym przekonaniem stwierdzam, że dorobek naukowy i zawodowy Kandydata w pełni odpowiada wymogom stawianym w Ustawie Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (art. 219 Ustawy) i wnoszę o dopuszczenie Kandydata do dalszych etapów procedury nadania stopnia doktora habilitowanego nauk technicznych.

A handwritten signature in black ink, appearing to be 'J. J. P.' with a flourish at the end.