

Świerk, 22.02.2024

Prof. dr hab. inż. Jacek Jagielski
Departament Fizyki Materiałów
Narodowe Centrum Badań Jądrowych

RECENZJA

Rozprawy doktorskiej Pana Magistra Marka Fedorova

Przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska pana magistra Marka Fedorova poświęcona jest zagadnieniom stabilności fazowej stopów o wysokiej entropii (HEA), a w szczególności opracowaniu i walidacji eksperymentalnej modelu pozwalającego na przewidywanie struktury stopu o zadanym składzie. Jednym z podstawowych uzasadnień dla badania stopów HEA Autor podaje ich wysoką odporność na defektowanie radiacyjne. Zastosowanie to jest obecnie jednym z głównych powodów zainteresowania stopami HEA jako materiałami strukturalnymi dla nowych generacji reaktorów jądrowych. Problem pozyskiwania energii dla obecnych i przyszłych pokoleń ma podstawowe znaczenie dla społeczeństwa, a energetyka jądrowa jest obecnie jedyną racjonalną technologicznie opcją rozwiązania tego problemu. Wybór tematyki badań należy więc uznać za uzasadniony i mający ogromne znaczenie gospodarcze, zarówno obecnie jak i w dającej się przewidzieć przyszłości.

Praca obejmuje bardzo szeroki zakres zagadnień od Teorii Funkcjonału Gęstości do badań eksperymentalnych konsekwentnie omawiając kolejne kroki na drodze od analizy lokalnej do analizy w skali makroskopowej rzeczywistych materiałów. Podejście takie jest dowodem na zrozumienie przez Autora aktualnych kierunków rozwoju i wyzwań stojących obecnie przed inżynierią materiałową, jakimi niewątpliwie jest rozwój holistycznego podejścia do projektowania nowych materiałów. Podejście takie obejmuje pełen zakres analiz, od symulacji struktury atomowej po walidację eksperymentalną struktury rzeczywistych materiałów i ich właściwości funkcjonalnych. Wybór tematyki jest więc bardzo trafny, aktualny, a podejście Autora do rozwiązywanych problemów dogłębne i staranne.

Cała rozprawa liczy 126 stron, końcową część rozprawy stanowią dwie publikacje wraz z materiałem pomocniczym. Publikacje te zajmują nieco ponad połowę przedstawionej rozprawy. Ustawa o stopniach naukowych i tytule naukowym dopuszcza taką formę w Art 13 punkt 2. Osobiście uważam, że przepisywanie uprzednio opublikowanych artykułów naukowych do rozprawy jest bezcelowe, w pełni akceptuję zatem taką formę przygotowania rozprawy. Spis literatury obejmuje 80 pozycji, nie jest to wyjątkowo duża wartość, ale niewątpliwie wystarczająca dla potwierdzenia dokonania przez Autora należytych studiów literaturowych.

Rozprawa zorganizowana jest w dość standardowy sposób, rozpoczynając się od wstępu i omówienia aktualnego stanu wiedzy przechodzi następnie do sformułowania hipotezy badawczej i celów pracy. Warto podkreślić, że hipoteza badawcza została jasno sformułowana, podobnie jak cel pracy, co prowadzi Autora do określania zadań badawczych podjętych w ramach rozprawy. Doceniam też fakt, że doktorant we wstępnej części pracy spojrzął na badane przez siebie zagadnienie nie tylko z punktu widzenia wyłącznie naukowego, ale również z szerszej perspektywy znaczenia podjętej tematyki dla społeczeństwa.

W pierwszej części rozprawy Autor przedstawia podstawy Teorii Funkcjonału Gęstości. Część ta jest wynikiem studiów literaturowych i ogólnego wykształcenia z zakresu fizyki i inżynierii materiałowej, wydaje się jednak, że warta jest zamieszczenia w rozprawie doktorskiej. Wykazuje zaangażowanie Autora w usystematyzowanie stosowanych przez Niego pojęć i stanowi potwierdzenie zrozumienia podstaw mechanizmów fizycznych stosowanych w pracy. Część ta jest napisana jasno i zrozumiale, co wskazuje na posiadanie przez Autora niezbędnego warsztatu naukowego do realizacji dalszych części pracy.

W dalszej części rozprawy Autor omawia szczegółowo metodologię badań i uzyskane wyniki. Główna część pracy poświęcona jest analizie stabilności fazowej stopów HEA o różnych składach z grupy Fe-Cr-Mn-Ni. Celem Autora jest określenie składów zapewniających jednofazową strukturę fcc stopu w szerokim zakresie temperatur, co powinno zapewnić wyższą ciągliwość uzyskanego materiału. Struktura ściennie centrowana (fcc) ma bowiem wyższą ciągliwość niż struktura przestrzennie centrowana (bcc) ze względu na ściśle upakowane płaszczyzny atomowe.

Kończącą część pracy stanowią dwie publikacje wraz z materiałem uzupełniającym, jedna opublikowana w *Physical Review*, druga w *Acta Materialia*.

W ramach pracy Doktorant przeanalizował 1300 struktur fcc wyznaczając ich entalpię tworzenia z teorii DFT. W tej części analiz Autor uwzględniał różne konfiguracje magnetyczne stopów. W kolejnym etapie badań Autor wykorzystał 835 struktur najbardziej stabilnych magnetycznie do obliczeń metodą Cluster Expansion (CE). Kolejnym etapem pracy było wykorzystanie metody Monte Carlo do analizy stabilności termicznej i możliwych temperatur przemian fazowych.

Po dokonaniu analizy struktur fcc Autor przechodzi do podobnych obliczeń dla struktur bcc, co w konsekwencji pozwala mu na porównanie stabilności obu faz.

Kolejnym rozdziałem pracy jest eksperymentalna walidacja wyników obliczeń. Już na wstępie pozytywne wrażenie robi fakt imiennego wskazania współpracowników Autora, którzy wykonywali pomiary eksperymentalne. Z deontologicznego punktu widzenia wydaje się to oczywiste, z doświadczenia jednak wiem, jak często autorzy rozpraw zapominają o właściwym uznaniu autorstwa zespołowych wyników. Część ta wydaje się nieco zbyt krótka w porównaniu z częścią teoretyczną, a w szczególności dotyczy to dyskusji wyników i możliwego wpływu dokładności pomiarów użytymi metodami eksperymentalnymi.

Ostatnią częścią manuskryptu jest podsumowanie i plany dalszych prac. Podsumowanie jest bardzo zwięzłe, aczkolwiek omawia główne tezy pracy. Ostatnim zdaniem podsumowania jest odniesienie się do hipotezy badawczej, co podkreśla logiczną strukturę rozprawy.

Oczywistym obowiązkiem recenzenta jest krytyczna analiza pracy, w tym przypadku mająca charakter raczej sugestii mających na celu pomoc Doktorantowi w dalszej karierze naukowej niż negatywnej oceny. Najważniejszym elementem tych uwag jest konstrukcja rozprawy doktorskiej w dużym stopniu wykorzystująca opublikowane uprzednio artykuły naukowe. Podejście takie utrudnia określenie indywidualnego wkładu doktoranta w uzyskane wyniki i przygotowane publikacje. Moim zdaniem, w przypadku wyników służących jako podstawa rozprawy doktorskiej, wkład ten powinien być dominujący. Mam nadzieję, że Doktorant wyjaśni tę wątpliwość w trakcie publicznej obrony w ramach odpowiedzi na uwagi recenzentów. Mam też niejaki wątpliwość, co do pewnych uwag zawartych we wstępie. Nie wydaje mi się, aby grafit był obecnie rozważany jako materiał do użycia w wewnętrznej części reaktorów fuzyjnych. Grafit może akumulować izotopy wodoru, w tym tryt, co uniemożliwiłoby wejście ludzi do komory reaktora. Z tego względu jakiś czas temu grafit i jego

kompozyty zostały wyeliminowane z użycia w komorach tokamaków czy stellaratorów. Zagadnienie to nie ma znaczenia dla ogólnej oceny pracy, wspominam o im jedynie ze względów ogólnodydaktycznych.

Jako fizyk o zdecydowanie eksperymentalnych zainteresowaniach za najciekawsze wyniki pracy uważam zależności zaprezentowane na Rys 18 i Rys 8 (w pracy opublikowanej w Acta Materialia). Możliwość przewidywania struktury, a w konsekwencji właściwości funkcjonalnych, materiału na podstawie obliczeń teoretycznych jest ogromnym wyzwaniem i stanowiłaby przełom w projektowaniu nowych materiałów. Wyniki pomiarów eksperymentalnych zamieszczonych w pracy Acta Materialia potwierdzają prawie 100% zawartość fazy fcc w próbkach o składach przewidzianych przez obliczenia wykonane w pracy co, jak należy podkreślić, stanowi znaczną poprawę w stosunku do materiałów opracowanych w ORNL. Trudno o bardziej ewidentne potwierdzenie poprawności obliczeń i potencjału wykorzystanej przez Autora metody, a właściwie kilku komplementarnych metod. Z niecierpliwością czekam na niezależne potwierdzenie tych wyników.

Dla ścisłości, głównie ze względów dydaktycznych, powinienem też wspomnieć o pewnych usterkach redakcyjnych pracy. Z formalnych uchybień należy zauważyć:

1. Wszystkie skróty i akronimy, jakimi Autor posługuje się w pracy powinny być wyjaśnione. Już we wstępie na Rys. 1 pojawia się skrót LULUCF, a na Rys. 2 skrót EMDEs, oba skróty nie są wyjaśnione w tekście.
2. Rys. 4: przedstawia obrazy uzyskane z mikroskopii transmisyjnej. Takie obrazy powinny zawierać informację o skali, najlepiej w postaci markera o określonej długości.
3. Rys. 5: w każdej prezentacji wyników w formie wykresu wskazane jest opisywanie osi na wykresach.

Drobne uwagi techniczne i formalne o charakterze pozytywnym.

1. Doceniam fakt, że Autor używając wyników opublikowanych w innych pracach cytuje źródła, co jest oczywiste, ale również występował o zgodę na wykorzystanie tych wyników do właścicieli praw autorskich. Staranność godna pochwały. Przykład: Rys. 4.

Podsumowując: uważam, że rozprawa przedstawiona przez pana magistra Marka Fedorova stanowi znaczące osiągnięcie na drodze do budowania spójnego systemu obejmującego wykorzystanie symulacji struktury atomowej dla stworzenia materiału o pożądanym strukturze i właściwościach. Z pełnym przekonaniem wnioskuję o dopuszczenie Doktoranta do publicznej obrony.

Przedstawioną mi do oceny pracę oceniam zdecydowanie powyżej przeciętnej dla znanych mi rozpraw doktorskich z dziedziny inżynierii materiałowej. Biorąc pod uwagę ogólną ocenę pracy a także spełnienie wymogów formalnych dla prac doktorskich zasługujących na wyróżnienie (publikacja wyników w czasopiśmie o wysokim Impact Factor, odpowiadających wymogom Uchwały Rady Naukowej Dyscypliny Inżynieria Materiałowa Politechniki Warszawskiej) rekomenduję też rozpatrzenie wniosku o wyróżnienie rozprawy.

