

Białystok, 10.03.2023 r.

dr hab. inż. Zbigniew Oksiuta, prof. PB
Politechnika Białostocka
Wydział Mechaniczny
ul. Wiejska 45 C
15-351 Białystok
e-mail: z.oksiuta@pb.edu.pl

Recenzja
osiągnięcia naukowego, aktywności naukowej, dydaktycznej i organizacyjnej
dr inż. Jana Stanisława Wróbla
w związku z postępowaniem o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego
w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych w dyscyplinie inżynieria materiałowa

Podstawą opracowania niniejszej recenzji było zlecenie Przewodniczącego Rady Doskonałości i Rady Naukowej Dyscypliny Inżynierii Materiałowej (pismo z dnia 20 grudnia 2022 roku) wraz z dołączoną dokumentacją przewodu habilitacyjnego.

1. Sylwetka Habilitanta

Dr inż. Jan Wróbel w 2007 roku ukończył studia na Wydziale Fizyki Politechniki Warszawskiej i uzyskał tytuł magistra inżyniera. Tematem jego pracy magisterskiej było „*Modelowanie własności strukturalnych ZnO z pierwszych zasad.*” W 2007 r. rozpoczął studia doktoranckie na Wydziale Inżynierii Materiałowej Politechniki Warszawskiej oraz przez okres 6 miesięcy pracował jako programista w Interdyscyplinarnym Centrum Modelowania Komputerowego i Matematycznego, Uniwersytetu Warszawskiego. Tytuł doktora nauk technicznych uzyskał w 2012 r. na Wydziale Inżynierii Materiałowej Politechniki Warszawskiej z tematyki związanej z modelowaniem ab initio właściwości sprężystych i termicznych faz międzymetalicznych La-X.

Po doktoracie, w latach 2013-2015, odbył 2,5-letni staż naukowy w Culham Centre for Fusion Energy, Anglia, w zespole prof. Sergei’a Dudarev’a. Opiekunem naukowym był prof. Duc’a Nguyen-Manh’a. W lipcu 2015 roku został zatrudniony na Wydziale Inżynierii Materiałowej Politechniki Warszawskiej, początkowo jako specjalista naukowo-badawczy, a od września 2020 roku do chwili obecnej jako adiunkt badawczy.

2. Ocena osiągnięcia naukowego Habilitanta

Na osiągnięcie naukowe Habilitanta składa się cykl 11 powiązanych tematycznie współautorskich publikacji naukowych notyfikowanych w bazie Journal Citation Reports (JCR), pod wspólnym tytułem: „*Badanie przy użyciu metod ab initio stabilności fazowej oraz właściwości wieloskładnikowych stopów metali do zastosowań w reaktorach syntezy termojądrowej*”. Przedstawione do oceny artykuły zostały opublikowane w latach 2015-2021, po uzyskaniu przez Kandydata stopnia doktora.

Wszystkie publikacje powstały we współpracy z dość szerokim gronem współautorów (od 4 do 11). W czterech z nich dr inż. Jan Wróbel jest pierwszym współautorem, w siedmiu z nich jest drugim lub dalszym współautorem. W przypadku trzech artykułów Habilitant był również autorem do korespondencji. Udział wszystkich współautorów w przygotowaniu publikacji, wraz z opisem realizowanych zadań, został potwierdzony pisemnie i nie pokrywa się z wkładem wniesionym przez Habilitanta. Sumaryczny Impact Factor (IF) przedstawionych do oceny publikacji wynosi 44,492 (średnio na 1 artykuł 4,045), a liczba cytowani 535. Przy tym Habilitant nie wskazuje, czy jest to liczba cytowani bez autocytowań oraz nie przedstawia liczby punktów MNiSW. Deklarowany udział Habilitanta w publikacjach wynosi od 9 do 55%.

Rezultaty badań prezentowane w autoreferacie zostały opublikowane w renomowanych czasopismach naukowych, o wysokim wskaźniku wpływu (IF od 1,315 do 13,116), takich jak: *Physical Review*, *Acta Materialia*, *Nuclear Instruments and Methods*, *Journal of Physics*, *Science Advances* czy *Computational Materials Science*, co potwierdza istotny wkład Habilitanta w rozwój dyscypliny inżynieria materiałowa.

Wkład własny Kandydata, w większości przedstawionych do oceny artykułów, polegał na opracowaniu modeli CE (ang. Cluster Expansion), wykonaniu obliczeń z użyciem teorii funkcjonału gęstości (DFT) i przeprowadzeniu symulacji komputerowych MC (ang. Monte Carlo). Celem tych działań było określenia stabilności fazowej, termicznej i innych właściwości wieloskładnikowych stopów metali po ich napromieniowaniu, które mogą być użyte do budowy reaktora termojądrowego. Jako współautor prowadził również analizę i dyskusję otrzymanych wyników symulacji oraz kilkakrotnie sprawował nadzór nad przygotowaniem manuskryptu i sformułowaniem odpowiedzi na uwagi recenzentów, co stanowi istotny wkład w powstanie tych publikacji.

Przedstawiony do recenzji cykl publikacji stanowi bardzo spójne tematycznie osiągnięcie naukowe, które można podzielić na kilka zasadniczych części tematycznych. Artykuły H1 i H3 dotyczą symulacji komputerowych stabilności fazowej oraz defektów trójskładnikowych stopów Fe-Cr-Ni o strukturze regularnej przestrzennie centrowanej (bcc) i regularnej ściennie centrowanej (fcc). Przeprowadzone symulacje pozwoliły na ocenę stabilności struktur w funkcji temperatury oraz zrozumienie oddziaływań pomiędzy poszczególnymi atomami w stopach trójskładnikowych. Cennym wnioskiem wynikającym z tych analizy jest stwierdzenie wpływu stężenia dodatków stopowych zarówno na stabilizację fazową, właściwości magnetyczne stopu, przemianę fazową bcc→fcc oraz uporządkowanie krótkiego zasięgu (ang. SRO) poszczególnych par pierwiastków oraz, że na parametry sieci krystalicznej ma wpływ nie tylko promień atomowy (jonowy) danego pierwiastka, ale i zmiany (uporządkowanie lub jego brak) średnich momentów magnetycznych. Na uwagę zasługuje fakt, że uzyskane wyniki symulacji komputerowych zostały zweryfikowane doświadczalnie.

W publikacjach H2, H5, H7-H9 zostało przedstawione zagadnienie stabilności fazowej stopów o wysokiej entropii (HEA), w funkcji stężenia pierwiastków oraz ich właściwości sprężyste i magnetycznych, ze wskazaniem najlepszego materiału do budowy reaktora termojądrowego. Systematyczne badania stopów HEA ukazały, że uporządkowanie bliskiego zasięgu ściśle zależy od stężenia poszczególnych pierwiastków oraz, iż zwiększenie

zawartości tytanu intensyfikuje prawdopodobieństwo utworzenia stopu o strukturze nieuporządkowanej. Rezultatem tych symulacji i analiz było zaproponowanie odpornego na promieniowanie i o wysokich właściwościach mechanicznych stopu $W_{38}Ta_{36}V_{15}Cr_{11}$, którego właściwości radiacyjne zostały przebadane w Los Alamos National Laboratory, w USA.

Na uwagę zasługuje fakt, iż artykuł H7, autorstwa O. El-Atwani i inni: “Outstanding radiation resistance of tungsten-based high-entropy alloys”, został opublikowany w Science Advances, o wysokim wskaźniku IF=13,116. Przy tym deklarowany wkład Habilitanta w powstaniu tego dzieła wyniósł tylko 9%.

Ponadto wydaje się, że opisany w artykule H7 brak defektów radiacyjnych powstałych podczas napromieniowania jonami kryptonu układu W-Ta-V-Cr może sugerować, że użyta do badań energia 8 dpa (displacements-per-atom) jest stosunkowo mała (np. dla stali ODS zakłada się do 150 dpa i temperaturę 723÷923 K), a dodatkowy czynnik w postaci podwyższonej temperatury (1050 K) może powodować zanik pustek i anihilację dyslokacji w badanym stopie. Poza tym, istnieje jeszcze potrzeba zweryfikowania właściwości mechanicznych tego stopu W-Ta-Cr-V, gdyż w artykule przedstawiono tylko twardość z użyciem nanoindentera.

Kolejne artykuły [H3 i H11] są naturalną konsekwencją wcześniejszych analiz opartych na teorii funkcjonału gęstości (DFT), zastosowanej w celu lepszego poznania defektów punktowych powstających podczas napromieniowania stopu Fe-Cr. Interesującą konkluzją tych symulacji było ustalenie relacji pomiędzy sprężystym oddziaływaniem defektów punktowych, a stężeniem chromu.

Stabilność fazowa i gęstość defektów punktowych powstałych podczas napromieniowania stopów wolframu z dodatkiem renu i osmu jest tematem wiodącym publikacji H4 i H10. Zjawisko transmutacji wolframu było szeroko badane w latach 90-tych ubiegłego stulecia, natomiast przedstawione przez Habilitanta uzyskane wyniki badań i ich analiza istotnie poszerzają ogólną wiedzę dotyczącą powstawania defektów w stopach W-Re poddanych napromieniowaniu oraz ich stabilność fazową. Ważną innowacją zaproponowaną przez Kandydata jest wykonanie obliczeń DFT przy założeniu, że wakanse są traktowane jak atomy dodatkowego pierwiastka. Takie podejście pozwoliło na rozwinięcie modelu CE (Cluster Expansion) z układu trójskładnikowego W-Re-wakanse, do czteroskładnikowego układu W-Re-Os-wakanse. Na uwagę zasługuje fakt, że wyniki tych symulacji zostały zweryfikowane z użyciem tomografii APT.

W publikacji [H6] Habilitant wraz ze współautorami zaproponował model matematyczny pozwalający oszacować różnice energii między dwoma fazami stosując efektywne parametry magnetyczne Stonera, który to pozwolił na przybliżone wyjaśnienie, dla jakich stężeń pierwiastków stopowych w stopach o wysokiej entropii mogą pojawić się wydzielenia. Otrzymane wyniki badań modelowych zostały zweryfikowane doświadczalnie dla stopu Co-Cr-Fe-Ni wraz z dodatkami typu: Pd, Al, Ti i V, z użyciem dyfrakcji rentgenowskiej, potwierdzając tym samym użyteczność przedstawionych analiz, które powinno być dalej kontynuowane, ze względu na szeroki aplikacyjny charakter tych stopów.

W moim przekonaniu tematyka badawcza, którą zajmuje się Habilitant, stanowi oryginalny i bardzo istotny wkład w pogłębianiu wiedzy dotyczącej zjawisk zachodzących w stopach metali podczas napromieniowania. Przy tym Autor bardzo trafnie dobiera objekty badawcze, początkowo modelując powszechnie znane materiały trójskładnikowe, np.: stopy Fe-Cr-Ni czy stopy W-Re-Os, a następnie analizuje wieloskładnikowe stopy o wysokiej entropii, jako materiały alternatywne do produkcji reaktora termojądrowego. Zastosowanie stopów o wysokiej entropii do budowy reaktora jest zagadnieniem stosunkowo nowym i obiecującym, w szczególności, kiedy do ich wytwarzania użyte są pierwiastki o tzw. niskiej aktywacji. Istotny wkład Kandydata dostrzegam również w analizie wieloskładnikowych stopów z dodatkiem wolframu, jako materiału bazowego do dalszych rozważań teoretycznych dotyczących poszukiwań nowych materiałów do produkcji diwertora.

Co istotne, z analizy dorobku naukowego wynika również, że celem Habilitanta jest nie tylko rozwijanie metod numerycznych, ale i implementacja metod sztucznej inteligencji, w tym uczenia maszynowego (ang. Machine Learning), jako narzędzia wspierającego dobór odpowiednich materiałów do produkcji reaktora.

Uważam, że osiągnięcie opisane w ramach przedstawionego cyklu publikacji jest na wysokim poziomie merytoryczny. Zaproponowane rozwiązania problemów związanych z modelowaniem ab initio, licznosc symulacji i różnorodność złożonych obiektów badań (stopy wieloskładnikowe) oraz weryfikacja eksperymentalna proponowanych hipotez wskazują na obszerny zakres zainteresowań naukowo-badawczych Kandydata.

Przedstawione wyniki symulacji oraz ich analiza mają nie tylko charakter naukowy, ale i użyteczny i mogą być wykorzystane zarówno do budowy reaktora termojądrowego, jak i w innych gałęziach przemysłu.

Do najważniejszych osiągnięć Autora, mających wpływ na rozwój dyscypliny inżynieria materiałowa zaliczam:

- wyjaśnienie na podstawie symulacji ab initio złożonych zjawisk i stanów w rozpatrywanych układach wieloskładnikowych wraz z analizą wpływu pierwiastków i ich stężeń na stabilność fazową oraz właściwości wybranych stopów;
- określenie stabilności struktury fazowej stopów na bazie Fe-Cr-Ni w funkcji stężenia pierwiastków stopowych i temperatury;
- obliczenia numeryczne zjawisk dotyczących uporządkowania bliskiego zasięgu dla określonych par atomów w stopach wieloskładnikowych;
- wyjaśnienie wpływu wakansów na stabilność fazową stopów W-Re i W-Re-Os;
- oraz analizę numeryczną układu W-Ta-Cr-V wraz z oceną doświadczalną jego właściwości po kątem aplikacji jako materiał-kandydat do budowy reaktora termojądrowego.

Za pewne niedopatrzenie uważam brak komentarza odnośnie użycia w stopach mających zastosowanie do budowy reaktora termojądrowego pierwiastków typu: Ni i Mn, które nie należą do grupy tzw. low-activation elements oraz brak samodzielnej publikacji, która jednoznacznie potwierdziłaby dojrzałość naukową Habilitanta.

Podsumowując tę część rozprawy habilitacyjnej uważam, że przedstawiony do oceny cykl publikacji **formalnie spełnia kryterium nowości naukowej wymaganej w procedurze habilitacyjnej** i stanowi podstawę do stwierdzenia, że Habilitant wniósł znaczący wkład w rozwój dyscypliny inżynieria materiałowa, a prowadzone w szerokim zespole badawczym analizy, mają charakter pionierski i dotyczą bardzo ważnej problematyki otrzymywania nowoczesnych materiałów wieloskładnikowych, z możliwością ich aplikacji do budowy reaktora termojądrowego.

3. Inne osiągnięcia naukowego Habilitanta

Oceniając przedłożony do oceny dorobek aktywności naukowej niewymieniony w części zasadniczej autoreferatu, należy wyróżnić dwa okresy. W pierwszym, przed uzyskaniem stopnia doktora, Habilitant był współautorem 8 artykułów z listy JCR. Po doktoracie natomiast opublikował 31 artykułów z listy JCR, w tym 20, które nie zostały uwzględnione w cyklu publikacji przedstawionych do oceny. Jest to niewątpliwie znaczące uzupełnienie głównego dorobku prezentowanego w autoreferacie.

Na tej podstawie mogę stwierdzić, że Habilitant po doktoracie doskonale rozwinął i nadal rozwija metody numeryczne ab initio, DFT, MD do oceny stabilności fazowej, defektów i innych cech użytkowych wieloskładnikowych stopów metali.

W swym dorobku dr inż. Jan Wróbel nie przedstawił monografii naukowej i nie był też członkiem redakcji naukowej, natomiast jest autorem rozdziału w dwóch monografiach zespołowych.

Udział w konferencjach naukowych

Habilitant przed doktoratem brał udział w 17 wystąpieniach i sesjach plakatowych na krajowych lub międzynarodowych konferencjach. Po doktoracie aktywność ta została znacznie zwiększona do 28 konferencji, w tym 20 wygłoszonych i 8 w sesji plakatowej. Ponadto Autor wygłosił 5 wykładów na zaproszenie. Trzy w polskich ośrodkach naukowych i dwa w zagranicznych, co świadczy o szerokim zainteresowaniu jego tematyką przez inne ośrodki badawcze.

Uczestnictwo w projektach badawczych i grantach

Habilitant nie brał udziału i nie pełnił żadnej funkcji w komitetach organizacyjnych krajowych lub międzynarodowych konferencji, natomiast po uzyskaniu stopnia doktora dziewięciokrotnie uczestniczył w projektach badawczych i grantach finansowanych ze środków krajowych lub zagranicznych. W sześciu zrealizowanych projektach w latach 2016-2022 pełnił funkcję kierownika projektu lub kierownika zadania. W przypadku 5 projektów będących obecnie w trakcie realizacji, we wszystkich dr inż. J. Wróbel jest kierownikiem projektu lub kierownikiem zadania. Stąd też ten aspekt działalności Habilitanta należy ocenić bardzo pozytywnie.

Stáže naukowe

Dr inż. J. Wróbel odbył kilka staży naukowych w zagranicznych ośrodkach badawczych. Pomijając jeden 3-tygodniowy staż w Austrii, przed uzyskaniem stopnia doktora, po doktoracie zaliczam trzy z czterech wymienionych przez Habilitanta staży naukowych. Dwa w Saclay pod Paryżem (Francja) w latach 2019-2022, trwające od 2 do 3 tygodni i jeden staż trwający 2,5 roku w Culham Center for Fusion Energy (Anglia). Jednodniowe spotkania, jako członka grupy materiałowej w Uniwersytecie Oxfordzkim należy zaliczyć do obowiązków pełnionych w ramach stażu w Culham. Odbyte staże naukowe w zagranicznych ośrodkach, są w mojej ocenie wyraźnym wskaźnikiem samodzielności naukowej Kandydata.

Informacja o recenzowanych pracach naukowych

W tej kwestii Habilitant przedstawił jedną informację na temat członkostwa w Komitecie redakcyjnym, jako guest editor, w czasopiśmie Metals. Ponadto, zgodnie z Web of Science, był recenzentem 54 artykułów w takich czasopismach jak: Journal of Alloys and Compounds (13), Acta Materialia (7), Computational Materials Science (6), Journal of Nuclear Materials (4), Journal of Phase Equilibria and Diffusion (3), Materials Science and Engineering (3), Fusion Engineering and Design (2) i Metals (2).

Kandydat wykazał również uczestnictwo w zespołach oceniających wnioski o finansowanie badań naukowych, w konkursie PRELUDIUM NCN (Polska), Czech Science Foundation (Czechy) oraz w konkursie Dutch Research Council (Holandia). Współpracował z otoczeniem społecznym i gospodarczym z takimi partnerami jak: Airbus, RollsRoys, Avio, Fiat, Électricité de France, Ansaldo Nucleare, Framatome oraz firmy Pratt&Witney Polska i Materials Engineering Group. Był również wykonawcą badań na zamówienie dla takich firm jak: Boeing Company oraz IMRA Inc.

Pomimo iż dr inż. Jan Wróbel nie posiada wdrożeń technologicznych i patentów, jego ogólna ocena dorobku jest bardzo wysoka. Większość wymaganych w tym zakresie osiągnięć została spełniona w stopniu ponad przeciętnym. Habilitant jest aktywnym pracownikiem naukowym, a jego osiągnięcia spełniają wymagania stawiane habilitantom przez ustawodawcę.

Ocena dorobku dydaktycznego, popularyzatorskiego, organizacyjnego oraz współpracy z instytucjami

Habilitant wymienił liczne ośrodki naukowe i instytucje, z którymi podjął współpracę. Należy tu wymienić: Culham Centre for Fusion Energy, Oxford University, Anglia, CEA, University Paris-Sclay, Francja, CENIM-CSIC, Hiszpania, Forschungszentrum Jülich GmbH, Niemcy, Los Alamos National Laboratory, USA i szereg innych.

Dr inż. Jan Wróbel prowadził i prowadzi zajęcia dydaktyczne dla studentów Wydziału Inżynierii Materiałowej Politechniki Warszawskiej z takich przedmiotów jak: Projektowanie materiałów oraz Modelowanie komputerowe w projektowaniu materiałów.

W ramach działalności dydaktycznej był opiekunem naukowym dwóch prac magisterskich, jednej pracy inżynierskiej, promotorem pomocniczym w trzech przewodach doktorskich oraz opiekunem letniego stażu zagranicznego we Francji.

Habilitant jest również laureatem konkursu dla doktorantów, na konferencji 2nd International Conference on Advanced Materials Modeling (ICAMM), 14-16 czerwca 2012, Nantes, Francja oraz dwukrotnie uzyskał stypendium dla młodych uczonych w ramach programu START, finansowany przez Fundację na rzecz Nauki Polskiej i stypendium Centrum Studiów Zaawansowanych Politechniki Warszawskiej.

Dane naukometryczne

Efektom działalności naukowo-badawczej Habilitanta jest ogólna liczba 39 publikacji naukowych w czasopismach z listy JCR oraz liczne wystąpienia i prezentacje wyników badań na konferencjach krajowych i zagranicznych.

Podstawowe dane naukometryczne:

- sumaryczny IF (Baza Wiedzy PW) = 120,377;
- liczba cytowań (WoS) = 939 (847 bez autocytowań);
- indeks Hirscha (WoS) = 16;
- suma punktów MNiSW = brak danych.

Podsumowując działalność organizacyjną stwierdzam, że Habilitanta spełnił większość wymagań objętych ustawową Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, niezbędnych do nadania stopnia naukowego doktora habilitowanego. Dorobek Habilitanta oceniam bardzo wysoko. Na uwagę zasługuje 2,5 letni udział w stażu w Culham Centre for Fusion Energy, udział w licznych projektach badawczych oraz współpraca z innymi ośrodkami naukowymi zarówno w kraju, jak i za granicą.

Wniosek końcowy

Analiza przedstawionego do opinii autoreferatu pt. „*Badanie przy użyciu metod ab initio stabilności fazowej oraz właściwości wieloskładnikowych stopów metali do zastosowań w reaktorach syntezy termojądrowej*” wskazuje na wartościowy i znaczący dorobek naukowy, dydaktyczny i organizacyjny Habilitanta, wnoszący istotny wkład w dyscyplinę inżynieria materiałowa. Ilościowe wskaźniki naukometryczne dra inż. Jan Wróbla należy uznać za bardzo wysokie, potwierdzające aktywną działalność naukową.

W mojej ocenie Habilitant w swoim dorobku posiada wszystkie istotne osiągnięcia i kompetencje, które wskazują, ***iż dr inż. Jan, Stanisław Wróbel spełnia wymagania sprecyzowane w stosownej ustawie, co do kryteriów oceny osiągnięć osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego i zwracam się do Rady Doskonałości i Rady Naukowej Dyscypliny Inżynierii Materiałowej Politechniki Warszawskiej, o nadanie dr inż. Janowi Wróblowi stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych w dyscyplinie inżynieria materiałowa.***

Zbigniew Oksiuta