

Prof. dr hab. inż. Tadeusz BURCZYŃSKI, czł. koresp. PAN
Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN
ul. Pawińskiego 5B, 02-106 Warszawa
tel. +48 22 826 89 11
e-mail: tburczynski@ippt.pan.pl

Warszawa, 21.02.2017

Recenzja
rozprawy doktorskiej mgra inż. Piotra Kwaśniaka
pt. „Umocnienie roztworowe heksagonalnych stopów Ti modelowane
z pierwszych zasad”

1. Uwagi ogólne

Rozprawa doktorska mgra inż. Piotra Kwaśniaka jest poświęcona modelowaniu komputerowemu w skali nano zjawisk odkształcenia plastycznego i umocnienia roztworowego heksagonalnych stopów Ti ($\alpha - Ti$) przy wykorzystaniu metod obliczeniowych *ab initio*.

Numeryczna strona rozprawy związana jest z przybliżonym rozwiązaniem równania Schrödingera za pomocą teorii funkcjonału gęstości DFT (ang. *density functional theory*).

Praca powstała w Zakładzie Projektowania Materiałów Wydziału Inżynierii Materiałowej Politechniki Warszawskiej. Promotorem rozprawy jest dr hab. inż. Halina Garbacz, prof. nzw. Politechniki Warszawskiej.

Biorąc pod uwagę cel i zakres pracy, zastosowane metody badawcze oraz osiągnięte wyniki rozprawę można zakwalifikować do dyscypliny naukowej inżynieria materiałowa, z zaawansowanymi elementami z zakresu fizyki obliczeniowej i chemii obliczeniowej.

2. Zakres rozprawy

Rozprawa zawiera 119 stron i składa się ze streszczeń w j. polskim i j. angielskim, siedmiu rozdziałów, bibliografii oraz pięciu dodatków.

W rozdziale 1. będącym wprowadzeniem, Doktorant przedstawia podział stopów Ti oraz ich właściwości.

W rozdziale 2. opisane są kierunki rozwoju heksagonalnych stopów Ti.

Rozdział 3. zawiera opis odkształceń plastycznych i umocnienie roztworowe heksagonalnych stopów Ti.

Cel, tezę oraz zakres rozprawy Doktorant przedstawia w rozdziale 4.

Opis metodyki badawczej przedstawiony jest w rozdziale 5. Rozdział ten zawiera syntetyczny opis metody DFT, służącej do przybliżonego rozwiązania równania Schrödingera, a także obliczenia uogólnionej energii błędu ułożenia.

Wyniki obliczeń w postaci komentarza do uzyskanych wyników numerycznych, które zostały opublikowane w pięciu artykułach współautorstwa Doktoranta zawiera rozdział 6.

Podsumowanie i wolne wnioski umieszczone są w rozdziale 7.

Literatura zawiera 148 pozycji, przy czym nie ma wśród nich żadnej pozycji Doktoranta. Za to Dodatek zawiera 5 opublikowanych artykułów współautorstwa Doktoranta. Są to prace, które ukazały się w prestiżowych czasopismach:

- (i) *Materials Science & Engineering A*,
- (ii) *Materials Chemistry and Physics*,
- (iii) *Materials Letters*,
- (iv) *Physical Review B*,
- (v) *Acta Materials*.

W pracach tych zawarte są oryginalne wyniki badawcze, do których Doktorant odwołuje się w rozprawie i które w jakimś sensie stanowią integralną część rozprawy.

3. Ocena merytoryczna

W ostatnich latach obserwuje się duże zainteresowanie tytanem z uwagi na jego unikalne właściwości w postaci względnie małej gęstości, wysokiej wytrzymałości oraz odporności korozyjnej i biogodności. Te unikalne właściwości wynikają ze struktury elektronowej tytanu. Szczególnie interesujące są stopy tytanu. Oceniana rozprawa poświęcona jest oryginalnej, ważnej i ciekawej tematyce związanej z badaniem właściwości mechanicznych dwu- i trój-składnikowych heksagonalnych stopów tytanu.

Podjęcie tej tematyki należy uznać zatem za bardzo cenne, ma ona wszelkie walory aktualności, a także należy do jednych z trudniejszych zagadnień z zakresu inżynierii materiałowej, w której wykorzystuje się zaawansowane metody fizyki i chemii obliczeniowej.

Doktorant wykorzystał do tego celu opis w skali atomowej oparty na nierelatywistycznej mechanice kwantowej w postaci równania Schrödingera.

Do przybliżonego rozwiązania tego równania Doktorant zastosował jedną z metod *ab initio* - metodę DFT. Syntetyczny opis tej metody przedstawił Doktorant w rozdziale 5 pt. „Metodyka badawcza”.

Praca ma zatem charakter obliczeniowy i związana jest z takim podejściem do badania rzeczywistych zjawisk zachodzących w materiale, które oparte jest na modelowaniu i symulacji komputerowej zjawisk odkształcenia plastycznego stopów tytanu.

Doktorant stawia tezę, że „*analiza struktury elektronowej i identyfikacja podstawowych zjawisk zachodzących w skali atomowej podczas odkształcenia plastycznego umożliwi zdefiniowanie mechanizmów odpowiedzialnych za umocnienie roztworowe stopów α -Ti*”.

Podjęte badania numeryczne obejmowały dwa podejścia w ocenie plastyczności materiałów polikrystalicznych:

- (i) podejście pośrednie, polegające na obliczeniach macierzy stałych sprężystości monokryształów oraz kryteria plastyczności,
- (ii) podejście bezpośrednie, polegające na ocenie wpływu międzywęzłowych pierwiastków stopowych na poślizg i bliźniakowanie stopów α -Ti.

Do obliczeń numerycznych Doktorant zastosował komercyjne oprogramowania VASP (*Vienna Ab Initio Simulation Package*). Uzasadnił (str. 45) przyczyny, które spowodowały wybór z wielu istniejących kodów obliczeniowych właśnie VASP.

Zamieszczone w pracy wyniki obliczeń i symulacji komputerowych świadczą o bardzo dobrej znajomości problematyki badawczej, dużej pomysłowości i profesjonalności Doktoranta. Na szczególne uznanie zasługuje:

- (i) przeprowadzenie kompleksowej charakterystyki zmian właściwości mechanicznych stopów *Ti-O* w funkcji stężenia tlenu,
- (ii) zbadanie mechanizmów oddziaływania bliskiego oraz dalekiego,
- (iii) zbadanie wpływu oddziaływań węzłowych i międzywęzłowych składników stopowych na własności mechaniczne tytanu,
- (iv) zaadaptowanie metody NEB (*Nugded Elastic Band*) do obliczeń uogólnionej energii błędu ułożenia,
- (v) zaobserwowanie istnienia rozszczepionych systemów poślizgu oraz nowego mechanizmu migracji krystalicznej podczas poślizgu dyslokacji,

- (vi) zidentyfikowanie struktury atomowej i elektronowej wszystkich typów błędów ułożenia występujących w stopach α -Ti.

Na uwagę zasługuje wysoki poziom matematyczny i numeryczny rozprawy, raczej nie typowy dla rozpraw doktorskich z zakresu dyscypliny inżynieria materiałowa.

Struktura rozprawy jest logiczna i dobrze przemyślana. Język pracy nie budzi zastrzeżeń.

Przedstawione w pracy wyniki mają istotne znaczenie poznawcze, ale także mogą być użyteczne w projektowaniu nowych, lekkich materiałów konstrukcyjnych

4. Uwagi dyskusyjne

- Doktorant pisze, że „przebieg wielu zjawisk istotnych z punktu widzenia inżynierii materiałowej zależy od mechanizmów w skali atomowej, co utrudnia ich zrozumienie i systematyczną analizę opartą na badaniach eksperymentalnych”. Dalej pisze, że „wiele procesów zachodzących w skali atomowej może być opisywane w sposób kompleksowy dzięki rozwojowi metod obliczeniowych...” (str. 40). Wydaje się jednak, że dla uściślenia tych stwierdzeń należałoby zastanowić się, na ile model obliczeniowy jest adekwatny do rzeczywistych warunków oraz naszych oczekiwań związanych z wiarygodnością otrzymanych wyników numerycznych. Wiedza związana z wyznaczaniem i kwantyfikowaniem rzetelności i pewności symulacji komputerowych i ich predykcji jest związana z walidacją i weryfikacją. Są to kluczowe zagadnienia w badaniach rzeczywistych zjawisk za pomocą podejścia bazującego na modelowaniu i symulacji komputerowej. Rozprawa byłaby zatem pełniejsza gdyby znalazły się w niej jasne odniesienia do sprawy zagadnień walidacji i weryfikacji, np. czy potrafimy, a jeśli tak to jak, ocenić dokładność rozwiązania równania Schrödingera za pomocą DFT.
- Opis wzoru (5.20) jest niepełny. Na szczęście bardziej szczegółowy opis znajduje się w załączniku 1.
- Jako pozycje bibliograficzne [124] i [125] Doktorant podaje brzmiące tajemniczo: „Książka z domu”. Wymaga to wyjaśnienia.

5. Wniosek końcowy

Rozprawa doktorska Piotra Kwaśniaka poświęcona jest numerycznemu opisowi umocnienia roztworu heksagonalnych stopów Ti za pomocą metod obliczeniowych *ab initio*.

Analiza struktury elektronowej pozwoliła opisać podstawowe zjawiska zachodzące w skali atomowej w trakcie odkształcenia plastycznego i zidentyfikować mechanizmy odpowiedzialne za umocnienie roztworowe stopów Ti.

Doktorant zastosował metodę teorii funkcjonału gęstości do przybliżonego rozwiązania równania Schrödingera. Przeprowadził obliczenia właściwości sprężystych i plastycznych analizowanych układów oraz dokonał bezpośrednią ocenę plastyczności, opierającą się na obliczeniach uogólnionej energii błędu ułożenia.

Zamieszczone w rozprawie wyniki symulacji komputerowych są ciekawym i oryginalnym osiągnięciem Doktoranta.

Główny cel rozprawy został osiągnięty, a uzyskane wyniki stanowią bardzo cenną informację w identyfikacji aktywnych systemów poślizgu dyslokacji oraz określeniu nieznanych mechanizmów umocnienia roztworowego Ti.

Doktorant wykazał się dużą wiedzą i doświadczeniem.

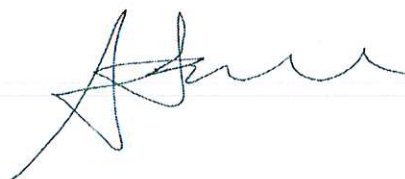
Biorąc pod uwagę przedstawioną opinię stwierdzam, iż praca mgr inż. Piotra Kwaśniaka w pełni odpowiada wymogom stawianym rozprawom doktorskim.

Doktorant jest dobrze przygotowany do prowadzenia samodzielnych badań naukowych, zwłaszcza w zakresie modelowania komputerowego w inżynierii materiałowej.

Warto także podkreślić współautorstwo Doktoranta 5. artykułów, które poświęcone są problematyce badawczej związanej z rozprawą doktorską i które ukazały się w latach 2013 – 2016 w prestiżowych czasopismach naukowych.

Dlatego uważam, że przedstawiona rozprawa doktorska w pełni spełnia warunki stawiane rozprawom doktorskim przez obowiązującą ustawę o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule naukowym w zakresie sztuki i wnoszę o dopuszczenie jej do publicznej obrony przed Radą Wydziału Inżynierii Materiałowej Politechniki Warszawskiej.

Jednocześnie z uwagi na wysokim poziom naukowy rozprawy oraz dorobek publikacyjny Doktoranta, zgłaszam wniosek o wyróżnienie rozprawy doktorskiej mgr inż. Piotra Kwaśniaka.



Prof. dr hab. inż. Tadeusz BURCZYŃSKI, czł. koresp. PAN

Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN

ul. Pawińskiego 5B, 02-106 Warszawa

tel. +48 22 826 89 11

e-mail: tburczynski@ippt.pan.pl

Warszawa, 21.02.2017

**Wniosek końcowy recenzji
rozprawy doktorskiej mgra inż. Piotra Kwaśniaka**

pt.

„Umocnienie roztworowe heksagonalnych stopów Ti modelowane z pierwszych zasad”

Rozprawa doktorska Piotra Kwaśniaka poświęcona jest numerycznemu opisowi umocnienia roztworu heksagonalnych stopów Ti za pomocą metod obliczeniowych *ab initio*.

Analiza struktury elektronowej pozwoliła opisać podstawowe zjawiska zachodzące w skali atomowej w trakcie odkształcenia plastycznego i zidentyfikować mechanizmy odpowiedzialne za umocnienie roztworowe stopów Ti.

Doktorant zastosował metodę teorii funkcjonału gęstości do przybliżonego rozwiązania równania Schrödingera. Przeprowadził obliczenia właściwości sprężystych i plastycznych analizowanych układów oraz dokonał bezpośrednią ocenę plastyczności, opierającą się na obliczeniach uogólnionej energii błędu ułożenia.

Zamieszczone w rozprawie wyniki symulacji komputerowych są ciekawym i oryginalnym osiągnięciem Doktoranta.

Główny cel rozprawy został osiągnięty, a uzyskane wyniki stanowią bardzo cenną informację w identyfikacji aktywnych systemów poślizgu dyslokacji oraz określeniu nieznanych mechanizmów umocnienia roztworowego Ti.

Doktorant wykazał się dużą wiedzą i doświadczeniem.

Biorąc pod uwagę przedstawioną opinię stwierdzam, iż praca mgr inż. Piotra Kwaśniaka w pełni odpowiada wymogom stawianym rozprawom doktorskim.

Doktorant jest dobrze przygotowany do prowadzenia samodzielnych badań naukowych, zwłaszcza w zakresie modelowania komputerowego w inżynierii materiałowej.

Warto także podkreślić współautorstwo Doktoranta 5 artykułów, które poświęcone są problematyce badawczej związanej z rozprawą doktorską i które ukazały się w latach 2013 – 2016 w prestiżowych czasopiśmie naukowych.

Dlatego uważam, że przedstawiona rozprawa doktorska w pełni spełnia warunki stawiane rozprawom doktorskim przez obowiązującą ustawę o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule naukowym w zakresie sztuki i wnoszę o dopuszczenie jej do publicznej obrony przed Radą Wydziału Inżynierii Materiałowej Politechniki Warszawskiej.

