



UNIWERSYTET ŚLĄSKI
W KATOWICACH

dr hab. Dariusz Chrobak, prof. UŚ
Instytut Inżynierii Materiałowej
Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych
Uniwersytet Śląski w Katowicach
ul. 75 Pułku Piechoty 1A
41-500 Chorzów

Chorzów, 2.04.2025 r.

RECENZJA

rozprawy doktorskiej **mgr inż. Amirhosseina Naghdi Dorabati**

pt. „*Advancing Understanding of Dislocation Dynamics in Metals Through Machine Learning-Enabled Analysis*”

Niniejsza recenzja została opracowana na zlecenie Rady Naukowej Instytutu Podstawowych Problemów Techniki Polskiej Akademii Nauk w związku z jej uchwałą z dnia 30 stycznia 2025 roku (pismo RN-D-0002.4.2024 z dnia 3 lutego 2025 roku).

1. Ogólna charakterystyka rozprawy

Poznanie praw rządzących nukleacją i dynamiką dyslokacji, lub inaczej mechanizmów odkształcenia plastycznego w materiałach krystalicznych ma trudne do przecenienia znaczenie dla rozwoju nauki i techniki. W szczególności umożliwia kształtowanie właściwości mechanicznych materiałów, za które odpowiedzialne są właśnie procesy dyslokacyjne. Poznanie mikroskopowej natury aktywności dyslokacyjnej w materiałach krystalicznych znakomicie ułatwia metoda klasycznej dynamiki molekularnej, dla której kluczowym jest wykorzystanie właściwego potencjału oddziaływania międzyatomowego. Właśnie z tymi zagadnieniami zmierzył się Doktorant w swojej pracy naukowej.

Rozprawa doktorska mgr inż. Amirhosseina Naghdi Dorabati zatytułowana „*Advancing Understanding of Dislocation Dynamics in Metals Through Machine Learning-Enabled Analysis*” jest oparta na czterech publikacjach:

- A) F. J. Dominguez–Gutierrez, P. Grigorev, **A. D. Naghdi**, J. Byggmästar, G. Y. Wei, T. D. Swinburne, S. Papanikolaou, M. Alava, *Nanoindentation of tungsten: From interatomic potentials to dislocation plasticity mechanisms*, Physical Review Materials 7(4), 043603 (2023).
- B) **A. D. Naghdi**, F. Pellegrini, E. Küçükbenli, D. Massa, F. J. Dominguez–Gutierrez, E. Kaxiras, S. Papanikolaou, Neural network interatomic potentials for open surface nano-mechanics applications, Acta Materialia 277, 1359-6454 (2024).
- C) **A. D. Naghdi**, K. Karimi, A. E. Poisvert, A. Esfandiarpour, R. Alvarez, P. Sobkowicz, M. Alava, S. Papanikolaou, Dislocation plasticity in equiatomic NiCoCr alloys: Effect of short-range order, Physical Review B 107(9), 094109 (2023).
- D) **A. D. Naghdi**, F. J. Dominguez–Gutierrez, W. Huo, K. Karimi, S. Papanikolaou, Dynamic Nanoindentation and Short-Range Order in Equiatomic NiCoCr Medium-Entropy Alloy Lead to Novel Density Wave Ordering, Physical Review Letters 132, 116101 (2024).

W powstaniu tych prac brało udział 18 osób.

Dokonania naukowe Doktoranta będące przedmiotem niniejszej recenzji skupiają się na modelowaniu indukowanego nanoindentacją odkształcenia plastycznego wolframu (praca **A**) oraz średnio-entropowego stopu NiCoCr (prace **C** i **D**). Interesująca praca **B** opisuje proces tworzenia oraz weryfikację nowego potencjału oddziaływania międzyatomowego dla molibdenu. W tej pracy wykorzystano metodę uczenia maszynowego opartą na teorii sieci neuronowych.

Doktorant, w swoich badaniach, wykorzystał przede wszystkim metodę klasycznej dynamiki molekularnej (MD), uzupełnioną o konieczne, z punktu widzenia postawionych celów, obliczenia metodą Monte-Carlo (MC), a także kwantowo-mechaniczną metodą opartą na teorii funkcjonału gęstości (DFT – density functional theory). W celu analizy wyników symulacji komputerowych wizualizowano istotne pliki konfiguracyjne badanych układów. Ponadto, badano stopień obsadzeniowego uporządkowania bliskiego zasięgu, obecność defektów liniowych metodą BDA (BCC Defect Analysis), jak również analizowano geometrię lokalnego otoczenia atomów metodami: CN (*coordination number*), CSP (*centrosymmetry parameter*) i CNA (*common neighbor analysis*). Odkształcenie plastyczne w modelowanych kryształach indukowano metodą nanoindentacji. Metoda ta, ze względu na niewielki promień zakończenia wgłębnika (około 100 nm), umożliwia badanie odpowiedzi sprężysto-plastycznej realnego kryształu w obszarach

pozbawionych defektów liniowych. Dzięki temu porównanie wyników symulacji metodą klasycznej dynamiki molekularnej z wynikami realnego eksperymentu są uzasadnione.

Za istotne cele naukowe uważam podjęcie przez Doktoranta tematyki indukowanego nanoindentacją odkształcenia plastycznego w średnio-entropowym roztworze stałym NiCoCr oraz budowę – w oparciu o model sieci neuronowej – nowego potencjału dla molibdenu o szerokim spektrum aplikacyjnym. Badania przeprowadzone przez Doktoranta niewątpliwie mieszczą się w zakresie dyscypliny naukowej inżynieria materiałowa.

Przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska składa się z dwóch części. Pierwsza to przewodnik/omówienie publikacji **A-D**, a druga zawiera kopie tych publikacji wraz z suplementami. Rozprawa jest napisana w języku angielskim, składa się z 6 rozdziałów i bibliografii liczącej 184 pozycji.

2. Ocena merytoryczna rozprawy

Przedstawiona do recenzji praca doktorska mgr inż. Amirhosseina Naghdi Dorabati pt. „*Advancing Understanding of Dislocation Dynamics in Metals Through Machine Learning-Enabled Analysis*” dotyczy naukowej weryfikacji tezy:

„Computational material science methods are critical in determining the accuracy of atomistic simulations, particularly in predicting dislocation dynamics in multi-component alloys and single-element materials. By effectively leveraging computational tools, such as interatomic potentials, one can improve the predictive power of molecular dynamics methods for dislocations modeling. My work centers on enhancing the utilization of existing interatomic potentials and development of machine learning potentials to more accurately capture dislocation dynamics in a manner that aligns with experimental results and hence facilitates materials design.”.

Teza pracy doktorskiej sprawia wrażenie zbyt ogólnej i jest w pierwszych dwóch zdaniach oczywista. Na przykład, jest jasne, że *„By effectively leveraging computational tools, such as interatomic potentials, one can improve the predictive power of molecular dynamics methods for dislocations modeling.”* Nawet ostatnie zdanie nie jest tezą, czyli stwierdzeniem, które należy udowodnić. W mojej opinii jest to raczej podsumowanie celów pracy naukowej Doktoranta. Ta wstępna uwaga nie zmienia mojego uznania dla wysiłku włożonego w powstanie recenzowanej rozprawy doktorskiej, a intencje autora wyjaśniają precyzyjnie sformułowane *key points*.

Dwa początkowe rozdziały stanowią wprowadzenie do tematyki pracy. W pierwszym, Autor przedstawił motywacje do podjęcia badań naukowych w dziedzinie modelowania odkształcenia plastycznego w metalach i roztworach stałych metali. Następnie zaprezentował najnowszy stan

wiedzy teoretycznej i eksperymentalnej dotyczący przebiegu zjawisk dyslokacyjnych w tych materiałach. W szczególności wiele miejsca poświęcono analizie publikacji naukowych przynoszących wyniki eksperymentów – w tym eksperymentów komputerowych – nad dynamiką dyslokacji w stopach NiCoCr. Interesującą częścią tego wstępnego rozdziału rozprawy jest omówienie osiągnięć i roli pól siłowych, opartych na różnych modelach uczenia maszynowego, w badaniu (w skali atomowej) procesów dyslokacyjnych, determinujących przebieg odkształcenia plastycznego.

W rozdziale 3 sformułowano tezę pracy doktorskiej, do której odniosłem się wcześniej. Czytając tę część rozprawy stwierdzam, że badania naukowe Doktoranta skupiły się na dwóch zasadniczych celach: stworzeniu nowego potencjału oddziaływania międzyatomowego dla molibdenu oraz na modelowaniu wpływu obsadzeniowego (chemicznego) uporządkowania bliskiego zasięgu na indukowane nanoindentacją odkształcenie plastyczne średnio-entropowego stopu NiCoCr.

Metodykę badań zastosowaną w rozprawie przedstawiono w rozdziale 4, którego pierwsza część poświęcono wykorzystanej w pracy naukowej metodzie symulacji komputerowych. Uzasadniono wybór potencjału oddziaływania atomowego dla stopu NiCoCr. Następnie omówiono sposób realizacji nanoindentacji w symulacjach komputerowych oraz metody analizy krzywych obciążenie-przemieszczenie (P - h , *load-displacement*). Co do podjętego sposobu przeprowadzenia symulacji komputerowych nie mam uwag krytycznych, ponieważ są one w dużym stopniu standardowe. Następnie, autor opisał sposób budowy potencjału oddziaływania międzyatomowego dla molibdenu w oparciu o jedną z metod uczenia maszynowego (sieci neuronowe). Wykorzystano system programistyczny PANNA (Properties from Artificial Neural Network Architectures) oraz deskryptory mBP (Behler-Parrinello) do reprezentacji konfiguracji (układów) atomów wykorzystanych później w fazie treningu i walidacji działania sieci neuronowej.

Wyniki przeprowadzonych badań naukowych przedstawiono w rozdziale 5. Podrozdział 5.1 ilustruje efekt doboru potencjału oddziaływania międzyatomowego na wyniki symulacji przebiegu indukowanego nanoindentacją odkształcenia plastycznego w wolframie (sieć typu BCC). Wykorzystano tutaj potencjały: EAM (embedded atom method), modyfikowany EAM, ABOP (analytic bond-order potential) oraz tabGAP (tabulated gaussian approximation potential). Podstawowe właściwości strukturalne i mechaniczne (stała sieciowa, energia kohezji, stałe sprężystości) są dobrze modelowane przez te potencjały. Zasadnicze różnice widać w wynikach symulacji przebiegu nanoindentacji wolframu i to pomimo tego, że krzywe P - h zarejestrowane dla różnych potencjałów są do siebie podobne. Przyczyny należy szukać w jakości modelowania poślizgu w systemie $\langle 111 \rangle \{110\}$. Otóż obliczenia zależności energii od wzajemnego przesunięcia

dwóch części kryształu (GSFE – generalized stacking fault energy) wykonane metodą DFT i przy pomocy potencjału tabGAP są znakomicie zgodne, czego nie można powiedzieć o innych potencjałach. Autorzy pracy **A** konkludują, że proces nukleacji i aktywności dyslokacyjnej w wolframie podczas nanoindentacji najlepiej modeluje potencjał tabGAP, co znajduje potwierdzenie w przytoczonych danych eksperymentalnych.

Prace nad przebiegiem indukowanego nanoindentacją odkształcenia plastycznego wolframu i wykazania (dla tego zagadnienia) większej przydatności potencjału zbudowanego w oparciu o metody uczenia maszynowego (tabGAP), skłoniły Doktoranta do udziału w pracach nad nowym potencjałem dla molibdenu, dedykowanym do modelowania przejścia sprężysto-plastycznego. O głównych elementach przyjętej metodologii (sieć neuronowa, deskryptory mBP, itd.) już wcześniej wspomniałem. Do treningu i walidacji działania sieci neuronowej, a w konsekwencji do oceny jakości aproksymacji powierzchni energii potencjalnej, Doktorant wraz z zespołem wykonali szereg obliczeń DFT dla różnych faz krystalicznych molibdenu i wybranych defektów punktowych. Ponadto brano pod uwagę rekonstrukcję powierzchni kryształu bcc-Mo, widmo fononowe, jak również krzywe GSFE dla systemów poślizgu: $\{110\}\langle\bar{1}11\rangle$, $\{211\}\langle\bar{1}11\rangle$. Głównym osiągnięciem tej części dorobku naukowego Doktoranta jest dostarczenie dobrej jakości potencjału oddziaływania międzyatomowego dla molibdenu, który dobrze opisuje, między innymi: indukowaną nanoindentacją propagację pętli dyslokacyjnych w płaszczyznach $\{112\}$, a także dostarcza właściwy model mechanizmu nukleacji tych pętli poprzez (*lasso – like mechanism*).

Po zapoznaniu się publikacjami naukowymi Doktoranta można stwierdzić, że głównych osiągnięć naukowych należy upatrywać w rezultatach symulacji aktywności dyslokacyjnej w średnio-entropowym roztworze stałym fcc-NiCoCr. Tutaj Doktorant brał udział w pracach podzielonych na dwie części. W pierwszej (publikacja **C**), modelowano wpływ temperatury na obsadzeniowe uporządkowanie bliskiego zasięgu (*chemical short-range order*). Wykorzystano dwa potencjały oddziaływania: Li-Sheng-Ma oraz Farkas-Caro, z których ten pierwszy dał rozsądne wyniki w zakresie uporządkowania bliskiego zasięgi jak i dynamiki dyslokacji. W wygrzewanych w temperaturach od 400 K do 1400 K układach stwierdzono segregację atomów prowadzącą do powstania obszarów o wysokiej zawartości niklu. Badano wpływ stopnia uporządkowania bliskiego zasięgu na dynamikę dyslokacji krawędziowej $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$, która pod wpływem przyłożonego naprężenia dysocjuje na dwie dyslokacje częściowe tworząc błąd ułożenia. W obszarze błędu ułożenia zaobserwowano, po raz pierwszy, znaczące zmiany uporządkowania bliskiego zasięgu. Ponadto stwierdzono, zwiększenie krytycznego naprężenia inicjującego ruch dyslokacji dla układu wykazującego obsadzeniowe uporządkowanie bliskiego zasięgu (950 MPa) w porównaniu z roztworem stałym nieuporządkowanym (650 MPa). W ostatniej publikacji **D** zawarto kluczowe

wyniki modelowania wpływu procesu nanoindentacji roztworu stałego NiCoCr na rozkład (reorganizację) obsadzeniowego uporządkowania bliskiego zasięgu. Istotnym elementem badań Doktoranta było zaprojektowanie procesu nanoindentacji, tak aby można było wpływać na rozkład przestrzenny obszarów wykazujących uporządkowanie bliskiego zasięgu. Okazało się, że wystarczające do tego celu jest wstrzymanie nanoindentacji po osiągnięciu maksymalnego obciążenia indentera (*dwelt nanoindentation*) na odpowiednio długi czas. Efektem zastosowanej procedury było powstanie charakterystycznego wzorca (DWO – *density-wave oscillation*) uporządkowania bliskiego zasięgu, który który charakteryzuje niemal równoległe pasma obszarów o wysokiej zawartości niklu. Interesujące jest to, że ten rodzaj porządku występuje w kierunkach {011}, a stopień jego rozwoju zależy tak od wielkości wgłębnika jak również od głębokości nanoindentacji. Autorzy publikacji **D** zauważyli korelację efektu DWO z rozkładem naprężeń von Mises'a.

Ostatni, 6 rozdział zawiera podsumowanie przeprowadzonych badań naukowych oraz wnioski. Za najważniejsze osiągnięcia naukowe Doktoranta uważam: zaproponowanie nowego potencjału oddziaływania dla molibdenu stworzonego w oparciu metodę sieci neuronowej, przeprowadzenie badań i analizę procesu porządkowania atomowego w roztworze stałym NiCoCr, oraz odkrycie i wyjaśnienie mechanizmu indukowanej nanoindentacją redystrybucji obszarów o wysokim stopniu uporządkowania bliskiego zasięgu w roztworze stałym NiCoCr.

Odnosząc się do strony edycyjnej rozprawy doktorskiej, muszę stwierdzić, że została przygotowana starannie, a odpowiednio wykonany podział wyników badań na poszczególne podrozdziały ułatwił zapoznanie się z nimi. Jak to często bywa, lektura rozprawy ujawniła kilka niedoskonałości:

1. Abstrakt napisany w języku polskim nie zawiera większości charakterystycznych liter.
2. We wzorze 4.1 (str. 17) brakuje znaku Δ .
3. Niezbyt dokuczliwy jest brak spisu rysunków i tabel.

Ponadto, korzystając z okazji proszę o wyjaśnienie następujących kwestii:

1. W dokumentacji procedury doktorskiej znalazłem potwierdzenia zakresu wkładu naukowego Doktoranta w powstanie publikacji **A-D**, takie jak: *Writing – review & editing*, *Writing – original draft*, *Visualization*, *Validation*, *Methodology*, *Formal analysis*, *Data curation*, *Conceptualization*. Jednak, brakuje mi tutaj słowa *Investigation*. Jaki jest rzeczywisty wkład doktoranta w powstanie najważniejszych prac **B**, **C** i **D**?
2. W pracy **B** dotyczącej nowego potencjału dla Mo, na Rys 9 przedstawiono obraz topografii powierzchni otoczenia wgłębienia powstałego dla maksymalnej głębokości indentacji.

Porównano ją z wynikami zamieszczonymi w pracy [90], jednak te odpowiadają stanowi powierzchni po indentacji. Czy modelowano etap odciążenia wgłębnika? Jeżeli tak, to czy efekty odkształcenia powierzchni widoczne na Rys. 9 zostały zachowane w stanie po odciążeniu?

3. W pracy **B** zamieszczono krzywe P - h . Czy ciśnienie kontaktowe inicjujące przejście sprężysto-plastyczne (pop-in) jest porównywalne z danymi doświadczalnymi, np. w pracy [90] lub innych? Czy Doktorant widzi sposób włączenia eksperymentalnych wartości ciśnienia kontaktowego w momencie wystąpienia pop-in'u w zespole danych wykorzystywanych do treningu sieci neuronowe?

2. Wniosek końcowy

Podsumowując stwierdzam, że założone cele pracy doktorskiej mgr inż. Amirhosseina Naghdi Dorabati zostały zrealizowane. Zakres tej pracy dobrze wpisuje się w obecny stan wiedzy i prezentuje wysoki poziom naukowy. Recenzowana rozprawa doktorska wykazała umiejętność Doktoranta do realizacji złożonych badań naukowych i jako całość stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego. Autor wykazał się szeroką wiedzą z zakresu inżynierii materiałowej, a w szczególności zjawisk dyslokacyjnych. Zademonstrował znajomość skomplikowanych metod symulacji komputerowych, a otrzymane wyniki zostały poprawnie zinterpretowane.

Wobec powyższego, stwierdzam, że przedłożona do recenzji rozprawa doktorska mgr inż. Amirhosseina Naghdi Dorabati pt. „*Advancing Understanding of Dislocation Dynamics in Metals Through Machine Learning-Enabled Analysis*” spełnia wymagania określone w art. 187 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce. W konsekwencji wnioskuję do Rady Instytutu Podstawowych Problemów Techniki PAN w Warszawie o jej przyjęcie i dopuszczenie do publicznej obrony.



dr hab. Dariusz Chrobak, prof. UŚ