

Kraków, dn. 03.04.2025

Recenzja

rozprawy doktorskiej mgr inż. Amirhosseina D. Naghdi zatytułowanej „Advancing Understanding of Dislocation Dynamics in Metals Through Machine Learning-Enabled Analysis”

Promotor: prof. Stefanos Papanikolaou

Na podstawie uchwały Rady Naukowej Instytutu Podstawowych Problemów Techniki PAN i pisma Sekretarza Naukowego prof. dr. hab. inż. Zbigniewa Ranachowskiego z dnia 3 lutego 2025

Przedstawiona rozprawa stanowi zbiór opublikowanych, powiązanych tematycznie, czterech artykułów:

- [1] Dominguez-Gutierrez, F.J., Grigorev, P., Naghdi, A.D. et al., *Nanoindentation of tungsten: From interatomic potentials to dislocation plasticity mechanisms*, Physical Review Materials, Vol. 7(4), 043603, 2023.
- [2] Naghdi, A.D. et al., *Neural network interatomic potentials for open surface nano-mechanics applications*, Acta Materialia, Vol. 277, 120200, 2024.
- [3] Naghdi, A.D. et al., *Dislocation plasticity in equiatomic NiCoCr alloys: Effect of short-range order*, Physical Review B, Vol. 107(9), 094109, 2023.
- [4] Naghdi, A.D. et al., *Dynamic Nanoindentation and Short-Range Order in Equiatomic NiCoCr Medium-Entropy Alloy Lead to Novel Density Wave Ordering*, Physical Review Letters, Vol. 132, 116101, 2024.

Mgr inż. Amirhossein D. Naghdi jest pierwszym autorem trzech publikacji i pełni rolę autora korespondencyjnego w drugim artykule. Wszystkie zaprezentowane prace opublikowano w czasopismach o wysokich współczynnikach wpływu, indeksowanych w bazie Journal Citation Report.

Głównym osiągnięciem Doktoranta jest opracowanie potencjału między atomowego opartego na sieciach neuronowych, który poprawniej odtwarza mechanizmy dynamiki dyslokacji w metalach, w stosunku do pól siłowych formułowanych analitycznie.

I. CHARAKTERYSTYKA ROZPRAWY, OMÓWIENIE CELU I ZAKRESU BADAŃ

Kandydat szczegółowo przedstawił cykl publikacji na 44 stronach opisu, załączając bibliografię złożoną z 184 pozycji oraz streszczenie w języku angielskim i polskim. Omówienie zbioru artykułów podzielone jest w sposób czytelny na 6 rozdziałów. Dwa pierwsze stanowią uzasadnienie celu i tezy pracy, sformułowanej w kolejnej sekcji. Następnie, omówiono metodykę badań i otrzymane rezultaty. Ostatni rozdział stanowi podsumowanie.

Bezpośrednią motywacją podjętych badań jest próba pokonania ograniczeń analitycznych potencjałów międzyatomowych poprzez włączenie sieci neuronowych. Takie podejście otwiera możliwość poprawnego opisu fundamentalnych mechanizmów rządzących dynamiką dyslokacji, a w rezultacie daje szansę na powiązanie właściwości mechanicznych materiału identyfikowanych na poziomie atomowym z rejestrowanymi eksperymentalnie w skali makroskopowej. Kandydat przyjął wolfram i molibden jako reprezentatywne materiały.

Drugi rozdział stanowi prezentację kontekstu dla rozwiązywanego zagadnienia badawczego. W sposób kompletny omówione są podstawowe rodzaje dyslokacji wraz z ich ruchem, siłami kontrolującymi przemieszczenia oraz naprężeniami potrzebnymi do aktywacji ruchu. Doktorant zwrócił uwagę, że formułowane modele powinny ujmować mechanizmy krystalicznej plastyczności oraz umocnienia odkształceniowego. W przeciwnym wypadku, nie są dobrze fizycznie uwarunkowane i stają się opisowymi. Mgr inż. Amirhossein D. Naghdi poprawnie przedstawił podział metod obliczeniowych pomiędzy poziomami skali: nano-, mikro-, oraz makroskopową analizą. W rezultacie wskazał na przepływ informacji z symulacji metodą dynamiki molekularnej (MD) do dynamiki dyskretnych dyslokacji i dynamiki pól dyslokacji. Teoretyczny opis został uzupełniony o eksperymentalną obserwację dyslokacji. Doktorant poprawnie zestawiał aktualnie wykorzystywane metody: transmisyjną elektronową mikroskopię jasnego i ciemnego pola, skaningową mikroskopię wysoko kąтового ciemnego pola (high-angle annular dark-field scanning transmission electron microscopy, HAADF STEM) oraz topografię przy użyciu promieniowania rentgenowskiego (X-ray diffraction topography) wraz różną charakterystyką dyslokacji, jaką generuje każda z nich. Kandydat opisał również obecne techniki in-situ, w transmisyjnej mikroskopii elektronowej (TEM) oraz topografii rentgenowskiej, umożliwiające rejestrację dynamiki dyslokacji. Mgr inż. Amirhossein D. Naghdi zachował dobrą sekwencję prezentowanych zagadnień. Na tle omówionej dynamiki dyslokacji w metalach, wskazał trudności jakie powstają w złożonych stopach wskutek nakładania pól odkształceń. Źródłem dodatkowych deformacji jest sieciowe odkształcenie oraz niedopasowanie występujące w stanie wolnym od obciążeń. W rezultacie, śledzenie ruchu dyslokacji zarówno metodą symulacji, jak i eksperymentalnie jest wyjątkowo trudne i wymaga zaawansowanego podejścia. Przedstawiony problem jednoznacznie pokazuje potrzebę tworzenia potencjałów międzyatomowych poprzez zastosowanie sieci neuronowych trenowanych na charakterystykach dynamiki dyslokacji. Na zakończenie rozdziału, Doktorant omówił ewolucję pól siłowych opartych na maszynowym uczeniu. Wskazał kluczowy zbiór danych wejściowych obejmujący właściwości sprężyste, charakterystyki rdzeni dyslokacji, uogólnione błędy ułożenia (generalized stacking fault, GSF), naprężenie Peierlsa. Ponadto, Doktorant zwrócił uwagę na wyższy stopień trudności w generowaniu poprawnych pól siłowych dla struktur regularnych ściennie centrowanych oraz heksagonalnych zwartych w stosunku do struktur przestrzennie centrowanych. Słusznie podkreślił, że potencjały międzyatomowe oparte na maszynowym uczeniu pozwolą w przyszłości utworzyć narzędzie skutecznego opisu

deformacji materiału wynikającej z fundamentalnych procesów zachodzących na poziomie atomowym.

Cel pracy został sformułowany w rozdziale trzecim. Mgr inż. Amirhossein D. Naghdi deklaruje opracowanie efektywnej metody tworzenia międzyatomowych pól siłowych dedykowanych nano-mechanicznym symulacjom, poprawnie opisujących dynamikę dyslokacji oraz stowarzyszone z nią zmiany energetyczne, w stosunku do modeli analitycznych

Rozdział 4 stanowi jasne omówienie poszczególnych etapów, jakie pokonał Mgr. inż. Amirhossein D. Naghdi aby otrzymać nowy sposób formułowania potencjałów międzyatomowych, zaproponowany w rozprawie doktorskiej. Pierwszy etap stanowi metoda Dynamiki Molekularnej (MD), wykorzystana do analizy dynamiki dyslokacji krawędziowych i oceny w jaki sposób modyfikuje je strukturalne, krótko zasięgowe uporządkowanie. Doktorant wykorzystuje dwa potencjały Li-Sheng-Ma oraz Farkas-Caro utworzone w schemacie zagnieżdżonego atomu (Embedded Atom Method, EAM), który okazał się najskuteczniejszym w opisie mechanicznej odpowiedzi metali i stopów. Symulacje prowadzone są w odpowiednim do tego zespole NPT. Drugi etap rozważań Mgr. inż. Amirhossein D. Naghdi to hybrydowa metoda łącząca metodę MD z techniką Monte Carlo (MC). Poprawnie wybrana została technika symulacji, prowadzona w zespole variance constrained semigrand-canonical (VCSGC). Algorytm ten pozwala na modelowanie stopów wieloskładnikowych z uwzględnieniem realnej mikrostruktury: granic ziaren, dyslokacji, swobodnych powierzchni. Test nano-indentacji stanowi trzeci etap analizy zawartej w pracy doktorskiej. Rozważany eksperyment jest podstawową metodą weryfikacji sformułowanego potencjału oddziaływań międzyatomowych, który powinien poprawnie opisywać deformację sprężystą i plastyczną generowaną w tym teście. Doktorant przedstawił model i warunki symulacji nano-indentacji, jak również przywołał wzory mechaniki kontinuum opisujące ciśnienie na powierzchni sferycznego wgłębnika oraz promień kontaktu, co pozwoliło wyprowadzić formułę dla krytycznych naprężeń stycznych, które uruchamiają odkształcenia plastyczne. Opis należący do teorii sprężystości stanowi wprowadzenie do późniejszej analizy defektów. Doktorant oparł ich identyfikację na trzech wielkościach: liczba koordynacyjna (coordination numer, CN), parametr centrosymetrii (centrosymmetry parameter, CSP), analiza wspólnych sąsiadów (common neighbor analysis, CNA). Amirhossein D. Naghdi założył, że charakterystyki te wyznaczone są przy promieniu cięcia, który obejmuje najbliższą, pierwszą sferę atomów sąsiednich w stosunku do centralnego oraz kolejną, drugą sferę. W rezultacie, liczba koordynacyjna dla struktury regularnej, przestrzennie centrowanej (body centered cubic, bcc), rozpatrywanej w obecnej dysertacji, wynosi 14. Ostatnim etapem zintegrowanego podejścia zaprezentowanego w rozprawie doktorskiej jest utworzenie potencjału oddziaływań międzyatomowych opartego na sieciach neuronowych. Mgr inż. Amirhossein D. Naghdi wykorzystał oprogramowanie PANNA (Properties from Artificial Neural Network Architectures) do trenowania tworzonego pola sił. Przyjął, że miarą podobieństwa jest charakterystyka Behler-Parrinello, która każdemu atomowi przyporządkowuje wektor zawierający długości promieni prowadzonych do sąsiadów oraz kąty między tymi promieniami.

Doktorant przedstawił rezultaty prowadzonych badań w rozdziale 3. Interesującym odkryciem jest tworzenie pętli dyslokacji pryzmatycznych propagujących wzdłuż kierunku poślizgu $\langle 111 \rangle$, podczas indentacji powierzchni (001) wolframu w temperaturze obniżonej do 77 K [1]. Na uznanie zasługuje potencjał oparty na sieciach neuronowych. Selekttywne trenowanie sprawia, że pole siłowe jest efektywne obliczeniowo, a jednocześnie dostatecznie dobrze odtwarza zakresy odkształceń sprężystych i plastycznych monokryształu Mo [2]. Prawidłowe odwzorowanie uogólnionej energii błędu ułożenia (generalized stacking fault energy, GSFE) dla systemów poślizgu wzdłuż płaszczyzn $\{110\}$ i $\{211\}$ z uwzględnieniem defektu na kierunku poślizgu $\langle 111 \rangle$ pozwala otrzymać prawidłową zależność Hertza pomiędzy znormalizowanym maksymalnym naprężeniem stycznym, a znormalizowanym przemieszczeniem wgłębnika. W rezultacie, symulacja ujawniła sekwencje zdarzeń, która prowadzi do powstania pętli ścinania. Początek stanowią defekty powierzchniowe, które inicjują dyslokację krawędziową. Ponadto, symulacja indentacji powierzchni (001) Mo pokazuje charakterystyczne ślady poślizgów wzdłuż 4 kierunków $\langle 110 \rangle$, jak również identyfikuje powstanie pętli dyslokacji poprzez mechanizm 'lassa'. Mgr inż. Amirhossein D. Naghdi otrzymał dalsze interesujące wyniki przeprowadzając symulację MD stopu NiCoCr [3]. Badania wykazały, że obszar błędu ułożenia wydzielony przez linie dyslokacji posiada zdolność porządkowania mikrostruktury w układy krótko zasięgowego uporządkowania (short range order, SRO). W rezultacie, ruch dyslokacji zostaje skutecznie zablokowany. Ta sprzężona relacja stanowi podstawę do otrzymania stopów o wysokiej wytrzymałości. Ostatnia z prezentowanych prac [4] przedstawia istotne osiągnięcie Doktoranta. Mgr inż. Amirhossein D. Naghdi zademonstrował możliwość kontrolowania rozkładu stref SRO, poprzez indentację z czasowym utrzymaniem obciążenia. W rezultacie powstaje regularne rozmieszczenie obszarów SRO. Otrzymywany wzór zależy od orientacji kryształu, promienia wgłębnika, jak również głębokości penetracji.

Prezentacja cyklu publikacji została podsumowana w kompletny sposób w rozdziale 6.

II. PYTANIA I UWAGI KRYTYCZNE

1. Doktorant podkreślił w rozprawie, że poprawne modelowanie odpowiedzi mechanicznej stopów i metali wymaga prawidłowego odtworzenia zakresu sprężystego. Dlaczego zatem, potencjał NNIP przewiduje stałą sprężystą C_{12} z 23.9% błędem, podczas gdy potencjał EAM daje wartość różną o 1.26% od danej DFT? Czy wobec tego, potencjał NNIP może być stosowany w niskich kriogenicznych temperaturach?
2. Przedstawiona symulacja nanoindentacji daje możliwość opisu inicjacji odkształceń plastycznych. Badania uzyskują szczególną wartość, gdy stanowią uzupełnienie przeprowadzonych testów eksperymentalnych. Typowa nano-indentacja wykonywana wgłębnikiem Berkovicha w Mo (001) generuje odkształcenia plastyczne przy maksymalnych naprężeniach stycznych

15.4 GPa, 19.4 GPa (Jacob, S. et al., Mater. Des. 182 (2019) 107998). Jakie wartości otrzymywane są z symulacji NNIP?

3. Rysunek 5.7 pokazuje korelację pomiędzy odkształceniami plastycznymi, które przewiduje symulacja NNIP indentacji wgłębnikiem sferycznym oraz tymi, które generowane są podczas eksperymentu indentacji wgłębnikiem Berkovicha. Czy mechanizm ewolucji dyslokacji wykryty w symulacji pozostaje aktualny podczas eksperymentu? Jaka nastąpi zmiana jeżeli wgłębnik Berkovicha zostanie obrócony wokół swojej osi?
4. Interesującym aspektem przedstawionego cyklu prac jest opis odkształceń plastycznych dwóch monokryształów o strukturze BCC Mo i W, podczas indentacji wgłębnikiem sferycznym. Jakie cechy pozostają wspólne, a jakie są różnice dla dwóch zaprezentowanych procesów?
5. Obniżenie temperatury ma wpływ na mobilność dyslokacji. Stąd, testy rozciągania pokazują znaczący wzrost granicy plastyczności metali. Proszę o podanie relacji pomiędzy maksymalnymi naprężeniami stycznymi otrzymanymi dla indentacji W (001) w temperaturze 300 K oraz 77 K, a następnie porównanie jej z eksperymentalną zależnością.
6. Doktorant wykrył, że układ fal oscylacji gęstości atomów (density-wave oscillation, DWO) w stopach NiCoCr jest wyznaczany przez maksymalne naprężenia Misesa oraz naprężenia główne (str. 39). Zgodnie z definicją, rozkłady tych naprężeń są różne. Stąd, powstają odmienne powierzchnie przełomu w materiałach ciągliwych i kruchych. Proszę o podanie definicji i sposobu obliczeń naprężeń Misesa i głównych oraz porównanie ich rozkładów w indentowanym stopie.
7. Doktorant wykazał, że obszary SRO wzmacniają materiał poprzez skuteczne blokowanie ruchu dyslokacji. Czy efekt wzmocnienia można uzyskać również w przypadku uszkodzeń stopu? W jaki sposób rozkład naprężeń wokół sferycznej pustki może wpłynąć na wzór SRO?

Błędy edycyjne:

1. Streszczenie w języku polskim zawiera liczne błędy składni oraz literówki. W dużej mierze, wyeliminowane są znaki polskie, co sprawia, że jest nieczytelny.
2. Na stronie 2, wektory Burgersa dla krawędziowej i śrubowej dyslokacji określone są jako odpowiednio: równoległy i prostopadły do linii dyslokacyjnej, co jest sprzeczne z faktyczną definicją.
3. Liczne błędy językowe: Burger's zamiast Burgers' (str. 2), can transition zamiast can transit (str.3), „related propertied” (str. 7), „prove difficult” (str. 8), „solving numerical solutions” (str. 9) stosowanie wielkich liter w środku zdania „and Interstitials” (str.3), The Emergence (str. 5), brak wielkich liter na początku zdania „[138]. machine ...” (str. 11), „(DFT). and” (str. 15), inne błędy: „FarakasCaro” (str. 15), „ $T = 5$, K” (str. 16), „WarrenCowley” (str. 34, 35).
4. Brak wyjaśnienia akronimów przy pierwszym użyciu: GSF (str. 11)

5. Jednostki pisane kursywą, zamiast zwykłą czcionką: „1 μ m” (str. 6), „600K” (str. 35), zmienne pisane zwykłą czcionką zamiast kursywą: „x=25” (str. 36)
6. Na stronie 33 rysunek 5.8 jest błędny. Przedstawia indentację powierzchni (001), natomiast podpis i analiza przedstawiona w tekście pracy dotyczy testu dla powierzchni (111).
7. Str. 33, rys. 5.8, kierunki krystalograficzne powinny być oznaczone w nawiasach kwadratowych, tymczasem wykorzystane są okrągłe określające płaszczyzny krystalograficzne.
8. Bibliografia zawiera liczne błędy językowe oraz edycyjne.

III. OCENA DYSERTACJI ORAZ WNIOSEK KOŃCOWY

Cykl prac przedstawiony przez mgra inż. Amirhosseina D. Naghdi obejmuje sekwencyjnie prowadzone badania, które dają dogłębny opis deformacji plastycznej metali i stopów, co w rezultacie umożliwia sterowanie mikrostrukturą materiału i pozwala na uzyskiwanie unikalnych właściwości mechanicznych. Na uznanie zasługuje zdolność Doktoranta do pokonywania barier i umiejętność stosowania złożonego aparatu matematycznego. W rezultacie, symulacje dynamiki molekularnej wykonywane są w poprawy sposób i ujawniają nowe zjawiska fizyczne, jak również mechanizmy studiowanych procesów. Opracowany potencjał oddziaływań międzyatomowych, oparty na sieciach neuronowych trenowanych na danych *ab initio*, generuje dokładniejszy opis odpowiedzi plastycznej metali, w stosunku do tradycyjnych, analitycznych modeli. W ten sposób, Doktorant przyczynił się do rozwoju nowej kategorii międzyatomowych pól siłowych wykorzystujących maszynowe uczenie. Przedstawione osiągnięcia Doktoranta stanowią znaczący wkład do dyscypliny Inżyniera Materiałowa.

Praca doktorska mgra inż. Amirhosseina D. Naghdi zatytułowana „Advancing Understanding of Dislocation Dynamics in Metals Through Machine Learning-Enabled Analysis” spełnia wszystkie wymogi Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce. Stąd, wnioskuję o dopuszczenie rozprawy do publicznej obrony. Biorąc pod uwagę znaczne osiągnięcia mgra inż. Amirhosseina D. Naghdi składam wniosek o wyróżnienie jego rozprawy doktorskiej.

Kinga Nalepka

Kinga Nalepka