

Warszawa, 06.05.2025

Prof. dr hab. inż. Tomasz Wejrzanowski
Politechnika Warszawska
Wydział Inżynierii Materiałowej

RECENZJA

rozprawy doktorskiej, pt. „Advancing Understanding of Dislocation Dynamics in Metals Through Machine Learning-Enabled Analysis”, której Autorem jest mgr. inż. Amirhossein Naghdi Dorabati. Recenzję opracowano na zlecenie Rady Naukowej Instytutu Podstawowych Problemów Techniki PAN.

1. Ogólna charakterystyka pracy

Przedłożona do recenzji praca doktorska koncentruje się na badaniu dynamiki dyslokacji oraz ich interakcji z innymi defektami struktury krystalicznej w stopach jedno- i wieloskładnikowych przy użyciu nowoczesnych metod obliczeniowych, takich jak uczenie maszynowe, dynamika molekularna, metody Monte Carlo oraz teoria funkcjonału gęstości (DFT).

Głównym celem pracy jest pogłębienie zrozumienia mechanizmów odpowiedzialnych za deformację plastyczną materiałów poprzez analizę zachowania dyslokacji oraz ich oddziaływań z innymi defektami strukturalnymi, takimi jak granice ziaren, wakanse czy błędy ułożenia.

Jednym z istotniejszych efektów wymiernych pracy jest implementacja metody tworzenia nowych potencjałów międzyatomowych. Metoda ta oparta jest na sieciach neuronowych, które pozwalają na dokładniejsze modelowanie zachowania materiałów podczas obciążeń mechanicznych w skali nano. Zastosowanie tych potencjałów w symulacjach nanoindentacji umożliwiło wierne odtworzenie zjawisk fizycznych, takich jak zarodkowanie dyslokacji, tworzenie pasm ścinania czy lokalne reorganizacje atomowe.

Wykorzystując opracowane potencjały, szczególną uwagę poświęcono stopom średnioentropowym NiCoCr, analizując wpływ termicznie indukowanego uporządkowania atomowego na odkształcenie plastyczne indukujące ruch dyslokacji.

Znaczenie pracy dla dyscypliny *inżynieria materiałowa* jest wielowymiarowe. Po pierwsze, dostarcza ona fundamentalnej wiedzy na temat zachowania się defektów w materiałach, co jest

kluczowe dla projektowania nowych materiałów o pożądanych właściwościach mechanicznych, takich jak twardość, ciągliwość czy odporność na pełzanie. Po drugie, rozwój i walidacja potencjałów opartych na uczeniu maszynowym otwierają nowe możliwości w symulacjach atomistycznych, znacznie zwiększając ich dokładność i przewidywalność. Po trzecie, praca wskazuje, że testy nano-mechaniczne mogą służyć nie tylko do pomiaru właściwości materiałów, ale także jako narzędzie do ich modyfikacji na poziomie atomowym - co ma istotne implikacje dla inżynierii materiałowej na poziomie nano- i mikrostrukturalnym.

W efekcie, wyniki pracy mają na tym etapie głównie wartość poznawczą. Aczkolwiek w mojej ocenie jej wyniki mają szansę na późniejsze zastosowanie przy wsparciu rozwoju zaawansowanych materiałów funkcjonalnych, konstrukcyjnych oraz powłok odpornych na ekstremalne warunki pracy.

Biorąc pod uwagę powyższe fakty, stwierdzam, że Doktorant podjął interesujący i istotny temat badawczy, a zaproponowana metodyka stanowi wartościowe i nowatorskie podejście do badania zjawisk w materiałach na poziomie atomowym. Jestem również przekonany, że wyniki ocenianej pracy doktorskiej mogą stanowić podstawę do podobnych analiz w odniesieniu do innych typów materiałów.

2. Ocena rozprawy

Przedłożona do recenzji rozprawa doktorska, napisana została w języku angielskim w oparciu o wyniki zamieszczone w 4 artykułach opublikowanych w prestiżowych czasopismach z listy JCR, w obszarach z dyscypliny inżynieria materiałowa i pokrewnych:

1. Javier Dominguez-Gutierrez, Petr Grigorev, Amirhossein D. Naghdi, Jesper Byggmästar, G. Y. Wei, Thomas D Swinburne, Stefanos Papanikolaou Mikko Alava *Nanoindentation of tungsten: From interatomic potentials to dislocation plasticity mechanisms, Physical Review Materials, Vol. 7(4), 043603, 2023.*
Impact factor (2023): 3.1
2. Amirhossein D. Naghdi, Franco Pellegrini, Emine Küçükbenli, Dario Massa, F. Javier Dominguez-Gutierrez, Efthimios Kaxiras, Stefanos Papanikolaou, *Neural network interatomic potentials for open surface nano-mechanics applications, Acta Materialia, Vol. 277, 120200. 1359-6454, 2024.*
Impact factor (2023): 8.3

3. Amirhossein D. Naghdi, Kamran Karimi, Axel E Poisvert, Armin Esfandiarpour, Rene Alvarez, Pawel Sobkowicz, Mikko Alava, Stefanos Papanikolaou, *Dislocation plasticity in equiatomic NiCoCr alloys: Effect of short-range order*, *Physical Review B*, Vol. 107(9), 094109, 2023.
Impact factor (2023): 3.2
4. Amirhossein D. Naghdi F. Javier Dominguez–Gutierrez, Wenyi Huo, Kamran. Karimi, Stefanos Papanikolaou, *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.
Impact factor (2023): 8.1

Wszystkie 4 prace stanowią publikacje wieloautorskie. W trzech publikacjach Doktorant jest pierwszym autorem, natomiast w jednej pracy występuje jako współautor na 3 miejscu. Z opisów dotyczących udziału Doktoranta w opracowaniu tych 4 prac zamieszczonych w samych publikacjach oraz dołączonych oświadczeniach wynika, że Jego wkład w powstanie tych prac był znaczący.

Praca liczy sumarycznie 148 stron, z czego 11 stron to strona tytułowa, podziękowania, spis treści, streszczenie w wersji polskiej i angielskiej oraz spis publikacji w oparciu, o które przygotowano rozprawę doktorską. Kolejne 61 stron stanowi właściwa część rozprawy doktorskiej obejmująca przegląd 4 opublikowanych artykułów naukowych. Ostatnia część pracy to wydruk publikacji z czasopism, co stanowi 76 stron.

Z punktu widzenia czytającego najbardziej istotna część rozprawy zawiera się w autorskim przeglądzie wyników prac, który zwykle spaja wyniki zawarte w poszczególnych artykułach nadając im szerszy kontekst naukowy.

Właściwy przegląd wyników badań Doktorant poprzedził przedstawieniem motywacji stojącej za podjęciem tematyki pracy oraz opisem podstaw mechanizmu odkształcenia dyslokacyjnego. W tej części przedstawił opis wyników eksperymentalnych zjawisk odkształcenia plastycznego wybranych grup materiałów, wskazując na istotne znaczenie modelowania komputerowego, w tym uczenia maszynowego jako narzędzia do głębszego ich zrozumienia. W mojej ocenie przedstawiony opis jest zwięzły, ale z drugiej strony wystarczający do zidentyfikowania istotnych obszarów badawczych pod kątem realizacji doktoratu.

Na bazie krótkiego przeglądu literaturowego Doktorant zdefiniował cele i tezę pracy. Cele ogólne pracy zdefiniował następująco:

1. Zastosowanie różnych, dostępnych, klasycznych potencjałów do analizy zjawiska ruchu i oddziaływania dyslokacji.
2. Opracowanie potencjałów w oparciu o uczenie maszynowe.
3. Przeprowadzenie symulacji procesu nanoindentacji dla wybranych stopów wieloskładnikowych.

Teza pracy sprowadza się do stwierdzenia, że:

„Metody obliczeniowe w nauce o materiałach odgrywają kluczową rolę w symulacjach atomistycznych, szczególnie przy prognozowaniu dynamiki dyslokacji w stopach wieloskładnikowych. Udoskonalanie istniejących potencjałów międzyatomowych oraz rozwijanie potencjałów opartych na uczeniu maszynowym pozwoli dokładniej opisać dynamikę dyslokacji a w przyszłości ułatwi projektowanie nowych materiałów.”

W mojej ocenie tak przedstawione cele pracy stanowią właściwie zadania badawcze, czyli opisują raczej zakres pracy. Teza pracy natomiast wydaje się w moim odczuciu zbyt ogólna i oczywista, co prowadzi do przeświadczenia, że w zasadzie nie wymaga udowodnienia na bazie przeprowadzonych badań własnych Doktoranta.

Kolejnym wartościowym rozdziałem jest opis metodologii. Autor drobiazgowo opisał tutaj zarówno klasyczne podejście do symulacji ruchu dyslokacji w stopach NiCoCr, jak i symulacji bardziej złożonych procesów. Ostatnia, równie istotna część tego rozdziału to opis metod tworzenia potencjałów międzyatomowych w oparciu o uczenie maszynowe oraz ich implementacji w ramach obliczeń na poziomie atomowym.

Po przedstawieniu metodologii Doktorant przechodzi do opisu wyników badań zawartych w 4 artykułach nadając temu rozdziałowi wyraźną chronologię.

W pierwszej części omawiania wyników prac przedstawiono wyniki potwierdzające ograniczenia empirycznych potencjałów w jednoskładnikowych metalach (W, Mo), a następnie pokazano zalety bardziej dokładnych potencjałów w badaniach mechanizmów odkształcenia. Badania te stanowiły część publikacji numer 1 i 2 i stanowiły wstęp do badania bardziej zaawansowanych układów wieloskładnikowych na bazie NiCoCr. Szczegółowym badaniom ruchu i oddziaływań dyslokacji w tych stopach poświęcone są artykuły 3 i 4.

Taki sposób prezentacji wyników w jeszcze lepszy sposób pozwala stwierdzić, że wiedza i doświadczenie Doktoranta było istotnie pogłębiane w ramach powstawania kolejnych prac.

Z analizy całej pracy wyłania się spójny obraz dobrze zaplanowanych i dobranych badań zmierzających do realizacji celu, który na obecnym etapie ma raczej wymiar poznawczy. Jakość

przeprowadzonych prac oraz forma ich prezentacji pokazują dużą dojrzałość naukową Doktoranta.

Analiza wyników prac pozwala przede wszystkim zrozumieć kluczową rolę potencjałów międzyatomowych w modelowaniu ruchu dyslokacji za pomocą dynamiki molekularnej.

Do najważniejszych osiągnięć Doktoranta, w mojej ocenie, zaliczyć można:

- 1) Krytyczną analizę ograniczeń klasycznych potencjałów zarówno dla prostych, jak i bardziej złożonych układów metalicznych. Autor wskazał konieczność dalszego rozwoju opisu oddziaływań międzyatomowych dla lepszego odwzorowania zachowania się defektów, w tym w szczególności dyslokacji.
- 2) Opracowanie i walidację nowych potencjałów dla Wolframu, Molibdenu i stopów na bazie NiCoCr. Umożliwiły one skuteczne modelowanie dynamiki dyslokacji podczas procesu nanoindentacji, w tym formowania wypiętrzeń, nukleacji dyslokacji i przejść sprężysto-plastycznych. W przypadku stopu wieloskładnikowego NiCoCr nowe potencjały pozwoliły na zbadanie wpływu uporządkowania krótkiego zasięgu (fluktuacji składu chemicznego) oraz nanowydzielen bogatych w Ni na zachowanie dyslokacji.
- 3) Porównanie wyników symulacji z badaniami eksperymentalnymi.

W podsumowaniu pracy Autor wskazuje także przyszłe wyzwania, których podjęcie ja również uważam za istotne. Należą do nich m.in.:

- 1) Rozszerzenie NNIP (z ang. Neural Network Interatomic Potentials) na bardziej złożone układy materiałowe. Pozwoli to rozszerzyć zakres zastosowania potencjałów dla stopów z dużą różnorodnością składników chemicznych i struktur krystalicznych, takich jak np. stopy o wysokiej entropii (HEA).
- 2) Integracja NNIP z metodami kwantowo-mechanicznymi (np. DFT, z ang. Density Functional Theory). Połączenie szybkości NNIP z dokładnością DFT jest trudne technicznie i obliczeniowo kosztowne.
- 3) Skalowalność i efektywność symulacji. Nowe metody muszą być nie tylko dokładne, ale również wystarczająco szybkie i skalowalne do symulacji dużych układów atomowych i długich czasów symulacji, co jest szczególnie istotne w zastosowaniach inżynierskich i przemysłowych.

Oczywiście, jak każda praca także i ta zawiera drobne błędy edytorskie oraz elementy dyskusyjne.

Do najważniejszych uwag merytorycznych, na które warto byłoby zwrócić uwagę i do których należałoby się odnieść należą:

- 1) Praca, jak już wspomniałem, w mojej ocenie ma na tym etapie głównie charakter poznawczy. Niemniej jednak Autor wielokrotnie zaznacza, że wyniki prac mogą posłużyć do projektowania nowych materiałów. W tym kontekście czuję trochę niedosyt, że Doktorant nie opisał potencjalnych możliwości zastosowania uzyskanych wyników w praktyce. Czy Doktorant mógłby rozwinąć trochę ten temat?
- 2) Jednym z podstawowych problemów klasycznej dynamiki molekularnej w symulacji odkształcenia materiału są duże prędkości odkształcenia, zdecydowanie wyższe niż w rzeczywistości. Skutkuje to często uzyskaniem wyższych naprężeń w stosunku do tych uzyskiwanych w typowych eksperymentach. Czy Doktorant stosując symulację procesu nanoindentacji zaobserwował ten efekt i jeśli tak, to w jaki sposób poradził sobie z odniesieniem wyników symulacji do eksperymentów?
- 3) W pracy Doktorant prowadził odbliczenia dla W, Mo i stopów NiCoCr. Co stało za takim doбором materiałów badawczych?

Uwagi szczegółowe

- 1) Brak polskich znaków w streszczeniu w wersji polskiej. Wersja polska streszczenia posiada również wiele błędów językowych.
- 2) Spis skrótów oraz symboli w znaczący sposób ułatwiłby lekturę pracy.

Chciałbym zaznaczyć, że przedstawione przeze mnie uwagi w żadnym stopniu nie umniejszają mojej wysokiej oceny pracy.

5. Ocena końcowa rozprawy doktorskiej

Przedstawiona rozprawa doktorska dotyczy ważnego obszaru badań podstawowych związanego z modelowaniem numerycznym zjawisk odkształcenia plastycznego w jedno- i wieloskładnikowych stopach metali.

Biorąc pod uwagę spójny zakres przeprowadzonych prac oraz sposób ich realizacji, pomimo uwag krytycznych, należy stwierdzić, że Autor wykazał się bardzo dobrym opanowaniem warsztatu badawczego w obszarze symulacji komputerowych na poziomie atomowym.

Pozwoliło to Doktorantowi w sposób prawidłowy zrealizować zaplanowane w pracy zadania, uzyskać wartościowe wyniki na ich podstawie sformułować właściwe wnioski, a wskutek tego zrealizować założony cel pracy.

Na podstawie powyższych stwierdzeń wyrażam opinię, że rozprawa doktorska mgr. inż. Amirhossein Naghdi Dorabati pt. „Advancing Understanding of Dislocation Dynamics in Metals Through Machine Learning-Enabled Analysis”, spełnia wszystkie wymagania ustawowe i wnoszę o dopuszczenie jej Autora do publicznej obrony przed Radą Naukową Instytutu Podstawowych Problemów Techniki PAN w Warszawie.



Tomasz Wejrzanowski

