

**Recenzja rozprawy doktorskiej  
mgr. inż. Mohammeda Javededa Akhtera**

**„Design and Optimisation of 2D Nanostructures based on Molybdenum”**

*Recenzja została opracowana na podstawie pisma z dnia 24 maja 2024 r. skierowanego do mnie przez Sekretarza Rady Naukowej Instytutu Podstawowych Problemów Techniki Polskiej Akademii Nauk (IPPT PAN), Pana prof. dr. hab. inż. Zbigniewa Ranachowskiego w związku z powołaniem mnie przez Radę Naukową IPPT PAN na recenzenta rozprawy doktorskiej Pana mgr. inż. Mahommeda Javededa Akhtera. Do pisma dołączony został egzemplarz rozprawy doktorskiej w języku angielskim wraz z wersją elektroniczną na płycie CD oraz dokumentacja.*

**1. Przedmiot recenzji**

Rozprawa doktorska Pana mgr. inż. **Mohammeda Javededa Akhtera** zatytułowana *Design and Optimisation of 2D Nanostructures based on Molybdenum* została wykonana pod opieką naukową **Pana dr. hab. Wacława Kusia**. Rozprawa obejmuje badania przeprowadzone w trakcie Jego studiów doktoranckich na Wydziale Informatyki i Nauk Obliczeniowych IPPT PAN oraz na Wydziale Mechanicznym Politechniki Śląskiej w Gliwicach. Praca została napisana w języku angielskim, liczy 133 strony. Zamieszczono w niej również wymagane ustawowo streszczenia: w języku polskim i angielskim.

**2. Tematyka, cel, zakres pracy**

W ostatnich latach w dziedzinie nanotechnologii można zaobserwować rosnące zainteresowanie materiałami dwuwymiarowymi (2D), co wywołane zostało powszechnym zastosowaniem grafenu. Struktury węglowe, takie jak grafen i nanorurki węglowe zostały dość dobrze przebadane, toteż inne pierwiastki i związki, takie jak dwusiarczek molibdenu ( $\text{MoS}_2$ ) również oferujące obiecujące możliwości tworzenia nowych nanostruktur 2D cieszą się dużą uwagą. Materiały te mają potencjał zrewolucjonizowania różnych dziedzin, od elektroniki po inżynierię lądową.

Dwuwymiarowy dwusiarczek molibdenu ( $\text{MoS}_2$ ), który jest pojedynczą warstwą minerału molibdenitu jest obiecującym materiałem dla następnej generacji przełączalnych tranzystorów i fotodetektorów, ma też potencjał do zastąpienia krzemu. W kontekście zastosowań  $\text{MoS}_2$  w nanourządzeniach oraz materiałach kompozytowych zrozumienie jego właściwości mechanicznych jest bardzo istotne, ponieważ istnieje krytyczna bariera w postaci mechanicznie słabych powierzchni międzyfazowych, które tworzą się gdy  $\text{MoS}_2$  kontaktuje się z przylegającymi materiałami. W związku z tym jednym z kluczowych wyzwań jest zaprojektowanie

stabilnych konfiguracji dla nowych nanostruktur 2D opartych na MoS<sub>2</sub> i wyjaśnienie, jak defekty nanostruktury wpływają na jej właściwości mechaniczne. W ten obszar badawczy wpisuje się tematyka przedłożonej rozprawy doktorskiej mgr. inż. Mahommeda Javededa Akhtera, w której przeanalizowano wpływ defektów nanostruktury na właściwości mechaniczne dwuwymiarowego MoS<sub>2</sub> korzystając z narzędzi statyki i dynamiki molekularnej, jak również sformułowane zostało zadanie optymalizacyjne. Celem jest zaproponowanie nowej metodologii do rozwiązania tego problemu: inteligentny numeryczny projekt tworzenia nowych 2D atomowo stabilnych nanostruktur opartych na MoS<sub>2</sub> o określonych właściwościach.

Celem badań doktoranta jest opracowanie metody inteligentnego projektowania dwuwymiarowych nanostruktur na bazie dwusiarczku molibdenu o określonych właściwościach mechanicznych w oparciu o współczesne metody modelowania numerycznego do analizy i optymalizacji materiałów dwuwymiarowych. Aby osiągnąć postawione cele, zastosowano podejście dwuetapowe:

1. **\*\*Symulacje MD\*\***: Przeprowadzono kompleksowe badania numeryczne w oparciu o wyniki uzyskane metodą dynamiki molekularnej (MD), aby zrozumieć mechanikę monowarstwy MoS<sub>2</sub>. Modelowanie przeprowadzono na zawieszanej wolnostojącej membranie, porównując wyniki z eksperymentem. Zbadano wpływ defektów strukturalnych na właściwości mechaniczne monowarstwy MoS<sub>2</sub> poprzez komputerowe modelowanie membran MoS<sub>2</sub> z defektami.
2. **\*\*Optymalizacja Ewolucyjna\*\***: Wykorzystując algorytmy ewolucyjne oraz zdobytą wiedzę z symulacji MD, przeprowadzono optymalizację nanostruktury MoS<sub>2</sub> w celu projektowania jednowarstwowych nanostruktur MoS<sub>2</sub> o precyzyjnie określonych właściwościach mechanicznych. Takie podejście umożliwiło opracowanie praktycznych strategii syntezy monowarstw MoS<sub>2</sub>.

Z całym przekonaniem stwierdzam, że tematyka pracy jest bardzo istotna a cel pracy, jak i objęty nią zakres badań jest bardzo ciekawy i w pełni odpowiada aktualnym wymaganiom w odniesieniu do prac doktorskich.

### **3. Ocena pracy**

#### **3.1. Ocena strony edytorskiej rozprawy**

Praca napisana została starannie, ładnym językiem angielskim. Układ treści rozprawy jest spójny i logiczny. Treść podzielono na pięć rozdziałów. Dołączono spis oznaczeń występujących w pracy. W pierwszej części rozprawy doktorskiej, obejmującej dwa początkowe rozdziały, na 53 stronach zawarto szczegółowe informacje wprowadzające w problematykę. Omówiono podstawowe kwestie związane z problematyką modelowania materiału w oparciu o metodę dynamiki molekularnej oraz z optymalizacją ewolucyjną. Dokonano szerokiego przeglądu aktualnego stanu wiedzy z obszaru przedmiotowego zagadnienia. W drugiej części rozprawy doktorskiej, obejmującej trzy kolejne rozdziały (60 stron) przedstawiono badania własne oraz informacje dotyczące przyjętej metodologii badań. Zaprezentowano uzyskane wyniki numeryczne oraz przeprowadzono ich szczegółową analizę. Pozwoliło to na sformułowanie wniosków przedstawionych w rozdziale piątym. Na pochwałę zasługuje staranność wykonania rysunków, zarówno ilustrujących omawiane zagadnienia, jak i tych, na których prezentowane są wyniki. Przyczynia się to do czytelności pracy oraz prowadzonych przez

doktoranta analiz i wywodów. Spis cytowanej literatury obejmujący aktualne doniesienia literaturowe zawiera 233 pozycje, w tym dwie współautorskie Doktoranta.

### 3.2. Ocena merytoryczna pracy

Praca rozpoczyna się od przeglądu literatury na temat atomistycznego, komputerowego modelowania monowarstwy  $\text{MoS}_2$ , wskazując na wysokie koszty obliczeniowe symulacji numerycznych oraz ograniczoną wiedzę na temat właściwości mechanicznych tego materiału w różnych warunkach wytwarzania. Pierwszym celem autora było stworzenie wydajnych obliczeniowo modeli molekularnych do analizy sztywności mechanicznej zarówno pierwotnego, jak i wadliwego  $\text{MoS}_2$  oraz wyjaśnienie, w jaki sposób defekty materiałowe wpływają na właściwości mechaniczne.

Realizacja tych badań, przedstawiona została szczegółowo w Rozdziale 3 przedłożonej Rozprawy. Aby je zrealizować Doktorant utworzył model komputerowy dwuwymiarowego dwusiarczku molibdenu  $\text{MoS}_2$  aby wykonać symulacje numeryczne materiału metoda dynamiki molekularnej z wykorzystaniem programu LAMMS. Oddziaływania międzyatomowe w nanostrukturach  $\text{MoS}_2$  opisane zostały potencjałem Stillinger-Webera. Ponadto opracował metody pozwalające na określenie właściwości mechanicznych nanostruktur. Obliczenia statyki molekularnej zostały wykonane przy użyciu kodu LAMMPS w celu wygenerowania stałych sprężystości  $\text{MoS}_2$ .

Przeprowadzone analizy wpływu defektów nanostruktury na właściwości mechaniczne skupiają się na badaniu właściwości mechanicznych  $\text{MoS}_2$ , ze szczególnym uwzględnieniem wpływu defektów strukturalnych i antystrukturalnych. Wykorzystano symulacje statyki molekularnej, które posłużyły do zbadania właściwości mechanicznych jednowarstwowych  $\text{MoS}_2$ . Autor zastosował innowacyjne podejście, wykorzystując obliczenia statyki molekularnej do analizy stałych sprężystości zarówno czystego, jak i wadliwego  $\text{MoS}_2$ . Obliczone stałe sprężystości spełniają kryterium stabilności mechanicznej Borna, co zapewnia integralność strukturalną materiału pod wpływem naprężeń. Wyniki tych badań wykazały, że stałe sprężystości nieskończonych warstw są izotropowe, co oznacza jednolitą orientację i zachowanie materiału. Istotnym wkładem pracy jest także analiza wpływu defektów punktowych na właściwości mechaniczne  $\text{MoS}_2$ . Symulacje obejmujące losowo rozmieszczone defekty w zakresie od 0% do 25% liczby atomów pozwoliły określić wpływ tych niedoskonałości na właściwości sprężyste materiału. Zaobserwowano, że najbardziej znaczący spadek wartości obserwuje się przy najwyższym odsetku defektów. Te wyniki umożliwiają przyszłe projektowanie nanourządzeń 2D opartych na  $\text{MoS}_2$ . Doktorant wykazał również, że wprowadzenie defektów tzw. „antystrukturalnych” znacząco wpływa na zachowanie mechaniczne  $\text{MoS}_2$  materiału. Ta część badań dostarcza cennych wskazówek do optymalizacji właściwości mechanicznych materiału w różnych zastosowaniach, zwłaszcza w urządzeniach optoelektronicznych i nanoelektronicznych.

Bazując na uzyskanych wynikach przedstawionych w tej części pracy, kolejna część skupia się na optymalizacji nanostruktury  $\text{MoS}_2$ . W Rozdziale czwartym niniejszej Rozprawy Doktorant przedstawia realizację drugiego celu badawczego, jakim było zaprojektowanie nano-

struktur MoS<sub>2</sub> o określonych właściwościach mechanicznych, inspirowanych badaniem ich sztywności mechanicznej. Aby osiągnąć ten cel, opracował metody optymalizacji nanostruktur oraz uzyskał rozwiązania dla określonych problemów optymalizacyjnych

Doktorant przedstawił hybrydowy algorytm optymalizacji, który łączy algorytm ewolucyjny (EA) i symulacje symulacje materiału MoS<sub>2</sub> na gruncie dynamiki molekularnej (MD). Komponent EA wykorzystuje operatory mutacji i krzyżowania, aby skutecznie eksplorować i wykorzystywać przestrzeń projektową. Operator krzyżowania zapewnia różnorodność wśród kandydatów na struktury, zapobiegając przedwczesnej konwergencji algorytmu do suboptymalnych rozwiązań. Ten innowacyjny algorytm pozwala na projektowanie nanostruktur MoS<sub>2</sub> o określonych właściwościach mechanicznych, co jest niezwykle użyteczne w praktycznych zastosowaniach. Pozwala użytkownikom definiować obszar projektowania, w tym puste miejsca (wakansy) materiału, oraz określać warunki brzegowe. Po uruchomieniu program iteracyjnie optymalizuje strukturę, aż do osiągnięcia pożądaných właściwości mechanicznych. Jeśli dalsza optymalizacja nie jest możliwa z powodu braku usuwalnych atomów, program kończy działanie, wskazując na awarię strukturalną. Mimo to wyprowadza najbardziej zoptymalizowaną konfigurację uzyskaną przed zakończeniem.

To podejście, w którym EA współpracuje z symulacjami dynamiki molekularnej, umożliwia precyzyjne określenie optymalnego rozmiaru eliptycznych pustek niezbędnych do uzyskania pożądaných cech mechanicznych. Sukces tej metodologii podkreśla jej skuteczność oraz potencjał w dostosowywaniu właściwości mechanicznych nanostruktur MoS<sub>2</sub>.

Podsumowując, rozprawa doktorska stanowi znaczący wkład w inżynierię mechaniczną w szczególności w nanomechanikę, prezentując zaawansowane i kompleksowe podejście do badania oraz optymalizacji właściwości mechanicznych nanostruktur 2D MoS<sub>2</sub>. Praca ta otwiera nowe możliwości w dziedzinie nanotechnologii, dostarczając narzędzi i wiedzy niezbędnych do tworzenia wysoce wytrzymałych i funkcjonalnych nanostruktur.

### 3.3 Uwaga

Ponieważ kluczowa dla całości przyjętej metodologii jest walidacja modelu molekularnego materiału, prosiłabym Doktoranta o szersze odniesienie się do tej kwestii podczas obrony pracy.

## 4. Ocena końcowa

Na podstawie przedstawionej do oceny rozprawy doktorskiej **mgr. inż. Mohammeda Javededa Akhtera** ustaliłam, że jej tematyka jest nowatorska i aktualna, zakres prowadzonych badań bardzo rozległy i spełnia ustawowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim. Prezentuje rozwiązanie bardzo złożonego problemu z wykorzystaniem nowoczesnych narzędzi obliczeniowych i przedstawia oryginalne i wartościowe rezultaty z dziedziny inżynierii mechanicznej. Dobrze nawiązuje do stanu aktualnej wiedzy, wnosi do nich nowe treści, co wskazuje na dojrzałość badawczą Doktoranta.

Praca prezentuje wysoki poziom merytoryczny i metodologiczny. Autor skutecznie wykorzystał zaawansowane techniki obliczeniowe, co pozwoliło na uzyskanie wartościowych

wyników. Interdyscyplinarność badań i innowacyjne podejście do projektowania nanostruktur zasługują na szczególne uznanie.

Ogólna ocena rozprawy jest bardzo wysoka.

## 5. Wniosek końcowy

Po zapoznaniu się z przedstawioną rozprawą **Mohammeda Javededa Akhtera** „*Design and Optimisation of 2D Nanostructures based on Molybdenum*” stwierdzam, że rozprawa ta stanowi oryginalne rozwiązanie trudnego problemu naukowego w dziedzinie nauk technicznych w dyscyplinie inżynieria mechaniczna i spełnia wymagania określone w: *Ustawa z dnia 20 lipca 2018 r.: Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce*, Doktorant wykazał ogólną wiedzę teoretyczną oraz zdolność do samodzielnego prowadzenia pracy naukowej. Wnoszę zatem o przyjęcie przez Radę Naukową rozprawy doktorskiej i dopuszczenie mgr. inż. **Mohammeda Javededa Akhtera** do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



Prof. dr hab. Anna Kucaba-Piętal