

Prof. dr hab. inż. Wojciech Sumelka
Politechnika Poznańska
Wydział Inżynierii Lądowej i Transportu
Instytut Analizy Konstrukcji
ul. Piotrowo 5, 60-965 Poznań
wojciech.sumelka@put.poznan.pl

Poznań, 02.08.2024

RECENZJA
rozprawy doktorskiej
mgr Mohammeda Javeeda Akhtera

1. Podstawa formalna recenzji

- Pismo Prof. Zbigniewa Ranachowskiego, sekretarza Rady Naukowej IPPT PAN, datowane na 24.05.2024;
- Ustawa z dnia 20 lipca 2018 Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz.U. 2018 poz. 1668, z póź. zm.);
- Ustawa z dnia 3 lipca 2018 Przepisy wprowadzające ustawę – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2018 r. poz. 1669, z póź. zm.).

2. Sylwetka Doktoranta

Współautor 2 prac, cytowanych 22 razy, indeks h 1 (baza Scopus). W przeszłości mgr Akhter studiował na Visvesvaraya Technological University, Belgaum, Karnataka, Indie (licencjat 2006-2010 i magister 2010-2013). Od 2018 roku jest doktorantem na studiach doktoranckich w IPPT PAN. Ponadto Kandydat prezentował swoje osiągnięcia na czterech konferencjach i współpracował z prof. Tadeuszem Burczyńskim przy projekcie (związanym z opiniowaną rozprawą doktorską), finansowanym przez Narodowe Centrum Nauki, przyznanym decyzją nr 2016/21/B/ST8/02450.

3. Charakterystyka i ocena rozprawy

3.1. Zawartość rozprawy

Rozprawa mgr Mohammeda Javeeda Akhtera „Design and Optimization of 2D Nanostructures based on Molybdenum” obejmuje 134 strony, w tym stronę tytułową,

podziękowania, listę symboli, spis treści, wstęp, streszczenie, pięć rozdziałów i bibliografię. Bibliografia składa się z 233 aktualnych pozycji, w tym dwóch współautorstwa Kandydata.

Rozdział 1 omawia wyzwania naukowe związane z materiałami 2D, w tym z dwusiarczkiem molibdenu (MoS_2), który jest najważniejszy z punktu widzenia przedstawionych rozważań. Ponadto, prezentacja stanu wiedzy pozwala na zdefiniowanie celów i zadań rozprawy. Rozdział kończy częściowe streszczenie zawartości pracy.

Rozdział 2 zawiera krótką dyskusję na temat symulacji dynamiki molekularnej (MD), a także optymalizacji ewolucyjnej (EO). Stwierdzono, że do analiz zostanie użyty program Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) (wykorzystujący potencjał Stillinger-Webera (SW)) wraz z oprogramowaniem OVITO do wizualizacji i analizy wyników MD. W celach optymalizacyjnych zaimplementowano algorytm memetyczny, który łączy globalny algorytm ewolucyjny z lokalnym algorytmem gradientu sprzężonego.

Rozdział 3 przedstawia pewne symulacje i charakterystyki monowarstwy disiarczku molibdenu (MoS_2) z losowymi defektami. Metodologia obejmuje symulacje z wieloma defektami, z różnymi procentowymi udziałami defektów w zakresie od 0% do 25%. Rozważane są następujące defekty: pierwotne i losowe defekty wakatów oraz losowo dyfundująca siarka do molibdenu ($\text{S} \rightarrow \text{Mo}$).

Rozdział 4 omawia optymalizację monowarstwy disiarczku molibdenu (MoS_2) z pojedynczą eliptyczną pustką. Optymalizacja miała na celu znalezienie wymiarów eliptycznej pustki w celu uzyskania globalnych referencyjnych właściwości materiału (składowych tensora sztywności 2D). Jako końcowy wynik przedstawiono sześć możliwych konfiguracji.

Rozdział 5 kończy rozprawę jasnym stwierdzeniem, że główny cel został osiągnięty (wprowadzenie i ocena hybrydowego algorytmu optymalizacji do projektowania dwuwymiarowych nanostruktur MoS_2 o określonych właściwościach mechanicznych). Ponadto zdefiniowano perspektywę dla przyszłych badań.

3.2. Ocena merytoryczna rozprawy

3.2.1. Uwagi ogólne

Temat przedmiotowej rozprawy, bez wątpienia należy do jednego z najważniejszych aktywnych obszarów badawczych w dyscyplinach inżynierii mechanicznej i materiałowej. Ponadto uzyskane wyniki mogą mieć bezpośredni wpływ na nowoczesne zastosowania przemysłowe, zwłaszcza te dotyczące urządzeń nano/mikro. W tym sensie najważniejszy aspekt każdej rozprawy doktorskiej, a mianowicie oryginalność, jest spełniony. Równie istotne jest, iż badania mogą być kontynuowane w przyszłości, dając Kandydatowi podstawę do zbudowania własnej grupy naukowej.

Rozdział 1 nie budzi większych zastrzeżeń. Przedstawiono kluczowe aspekty materiałów 2D z punktu widzenia eksperymentalnego i modelowania, wraz z jasną argumentacją na temat wyboru disiarczku molibdenu (MoS_2) do dalszych badań. Wyjaśniono zalety i ograniczenia (np. wady) MoS_2 , wskazując na konfiguracje jedno- i wielowarstwowe. Jednak rozdział 1.3 wprowadza mylące stwierdzenie: "Second, algorithms that are adept at avoiding entrapment in local optima is utilized to ensure the identification of the true global minimum energy configuration." - Recenzent nie był w stanie znaleźć w dalszych rozdziałach, że osiągnięto „true global minimum energy configuration”. Nie jest również jasne, dlaczego tylko rozdziały 3 i 4 są omawiane bez żadnych uwag na temat pozostałych podczas opisywania struktury rozprawy.

Rozdział 2 ma w zamierzeniu wprowadzać do wybranych aspektów teoretycznych MD i EO. Zdaniem Recenzenta rozdział ten powinien zostać podzielony na dwa kolejne, mianowicie 2.1-2.5 i 2.6-2.7. Ponadto rozdział 2.5 powinien znajdować się na początku rozdziału 3. Niestety rozdział 2 jest napisany bardzo niedbale, np. niektóre równania są podane w zapisie wskaźnikowym, a niektóre w notacji absolutnej – należy to ujednolicić. W rozdziale 2.5.2 nie jest jasne, w jaki sposób stosowane są warunki brzegowe. Nad rys. 2.6 mamy „1 fs”, powinno być „ 1fs^{-1} ”. Poniżej równania (2.21) mamy „Deformations of $1.0 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$, $5.0 \times 10^{-7} \text{ s}^{-1}$, and $1.0 \times 10^{-7} \text{ s}^{-1}$, were tested to ensure the deformation choice did not affect the final results. Elastic properties were obtained using a value of $5.0 \times 10^{-7} \text{ s}^{-1}$.” – co w tym przypadku oznacza „deformation” (deformacja ma

precyzyjne znaczenie w mechanice) i co oznacza „S⁻¹” pisane z dużej litery. Podrozdziały 2.6 i 2.7 nie dostarczają jawnych informacji na temat przepływu danych między MD i EO. Czy EO zostało wdrożone przez Kandydata, czy też oprogramowanie było gotowe/komercyjne? Jak ważny jest wybór funkcji celu, ponieważ powszechnie wiadomo, że w niektórych przypadkach ma ona kluczowe znaczenie.

Jak wspomniano powyżej, rozdział 3 omawia wpływ losowych defektów na właściwości mechaniczne monowarstwy dwusiarczku molibdenu (MoS₂). Analogicznie do rozdziału 2, rozdział 3 jest napisany bardzo niedbale, np. w wielu miejscach „GPa” jest zastąpione przez „Gpa” lub nie jest jasne, jak „N/m” odpowiada „GPa” w podrozdziale 3.2., ponadto równania 3.4, 3.12 zawierają błędy redakcyjne. Następnie na stronach 77 i 78 kąty są podane niepoprawnie, jest 900 i 1200, ale powinny wynosić 90° i 120°. Sekcja 3.6 nie dostarcza kompletnych informacji do powtórzenia obliczeń; jakie były dane wejściowe do programu LAMMPS (warunki brzegowe itp.)? Poniżej Tabeli 3.3. jest stwierdzenie, że „which corresponds to a good Young's modulus” – co oznacza „good Young's modulus”? Tabele 3.4 i 3.5 pokazują, że odpowiedź jest anizotropowa – powstaje pytanie czy taki rezultat jest poprawny, jeśli defekty są rozłożone losowo (szczególnie dla przypadku 25%)? Rys. 3.7 b nie odpowiada Tabeli 3.4 dla przypadku 25% – dlaczego? Rys. 3.9a, b, c nie odpowiada Tabeli 3.5 dla przypadku 25% – dlaczego? Ostatnie zdanie w rozdziale 3 jest mylące „Moreover, in this study, we review the possibility of physical properties improvement and strengthening the elastic stiffness properties due to defects in MoS₂ was confirmed.” – proszę porównać z rysunkami 3.7 i 3.9, gdzie przedstawiono degradację parametrów.

Rozdział 4 poświęcony optymalizacji monowarstwy dwusiarczku molibdenu (MoS₂) z pojedynczą eliptyczną pustką nie zawiera precyzyjnej definicji danych wejściowych do programu LAMMPS. Ponadto nie jest jasne, dlaczego pominięto dyskusję na temat składowej P₁₂. Nie jest jasne, dlaczego nie wszystkie przypadki przedstawione na rys. 4.6 nie są analizowane w tabeli 4.1. Zdaniem Recenzenta liczba przykładów obliczeniowych (właściwie jeden) przedstawionych w 4.3-4.4 jest bardzo ograniczona – wyniki te opublikowano w 2022 r., więc aby

przedstawić mocne argumenty za spełnieniem wszystkich celów rozprawy, dobrze widziane byłyby dodatkowe komentarze/dyskusje/uogólnienia.

Rozdział 5 nie budzi większych zastrzeżeń, z wyjątkiem tego, że przyszłe badania powinny najpierw znacznie rozszerzyć rezultaty przedstawione w podrozdziałach 4.3-4.4.

3.2.2. Uwagi szczegółowe

- Formatowanie pracy jest bardzo niedbałe, w tym: różne odniesienia do równań (raz „Eq. (2.4)” na innej stronie „Eqn. 2.1”); błędne formatowanie spisu treści; różne odniesienia do rozdziałów (raz „chapter 3.” na innej stronie „Chapter 3” lub „Chapter -1”); wiele stron jest bez numeracji;
- Istnieje wiele (niepotrzebnych) powtórzeń z akapitu do akapitu, np. w podrozdziałach 2.6, 2.7 i 2.71;
- Wiele rysunków jest bardzo niskiej jakości, np. 1.1, 1.5, 2.5 itd.;
- Język angielski powinien zostać istotnie poprawiony w przypadku przyszłej publikacji pracy.

3.3. Podsumowanie

Opiniowana rozprawa doktorska zasługuje na pozytywną ocenę. Przedstawione uwagi krytyczne (główne i szczegółowe) nie umniejszają wartości naukowej pracy. W rozprawie Kandydat osiąga oryginalne wyniki, które mogą stanowić podstawę dalszego rozwoju naukowego, zwłaszcza w inżynierii mechanicznej, materiałoznawstwie i bezpośrednich zastosowaniach przemysłowych.

4. Wniosek końcowy

Stwierdzam, iż rozprawa doktorska mgr Mohammeda Javeeda Akhtera "Design and Optimization of 2D Nanostructures based on Molybdenum" stanowi oryginalne rozwiązanie postawionego problemu naukowego, oraz że Kandydat wykazał ogólną wiedzę teoretyczną z zakresu analizy materiałów 2D, w tym umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej.

W związku z powyższym uważam, że rozprawa doktorska mgr Mohammeda Javeeda Akhtera "Design and Optimization of 2D Nanostructures based on Molybdenum" spełnia warunki określone w Ustawie z dnia 20 lipca 2018 Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce

(Dz.U. 2018 poz. 1668, z póź. zm.) i wnioskuję o jej przyjęcie przez Radę Naukową IPPT PAN i dopuszczenie jej do publicznej obrony.

