

Prof., dr hab. Ryszard Buczko
Instytut Fizyki PAN
Warszawa

Warszawa, 16 lutego 2023 r.

Ocena osiągnięcia naukowego dr. Francisco Javier Dominguez Gutierrez w związku z przeprowadzonym postępowaniem habilitacyjnym.

Dr Dominguez obronił doktorat w roku 2015 w Narodowym Uniwersytecie Meksyku. Pracował potem na Uniwersytecie Stony Brook w stanie Nowy Jork, USA oraz w Instytucie Fizyki Plazmy Maxa Plancka w Garching, Niemcy. W roku 2020 wygrał konkurs na stanowisko adiunkta w Centrum Doskonałości NOMATEN w Narodowym Centrum ds. Badań Jądrowych NCBJ w Świerku, gdzie pracuje do tej pory. Jako podstawę postępowania habilitacyjnego dr. Dominguez wskazał monotematyczną grupę 7 publikacji i zatytułował ją: „Atomistyczne modelowanie obliczeniowe uszkodzeń spowodowanych napromieniowaniem w materiałach krystalicznych i amorficznych w ekstremalnych środowiskach pracy”. Publikacje te opisują wyniki badań materiałów używanych w ekstremalnych warunkach w reaktorach jądrowych i eksperymentalnych reaktorach termojądrowych. Występujące tam warunki to przede wszystkim bardzo wysokie temperatury oraz styczność ze strumieniem plazmy powodujące erozję ścian i innych elementów reaktora. W tych warunkach następuje też wybijanie cząstek które z kolei zanieczyszczają plazmę. Dr Dominguez zajmuje się głównie symulacjami badanych zjawisk przy pomocy metod dynamiki molekularnej. Analizuje pojedyncze procesy oraz całe kaskady zdarzeń prowadzące do powstawania defektów w strukturze krystalicznej podczas bombardowania neutronami. Bada retencję deuteru, rozpylanie fizyczne i chemiczne z powierzchni amorficznych materiałów. Charakteryzuje też właściwości mechaniczne materiałów. Stosuje klasyczne i uczące się algorytmy. Jest też twórcą nowej metody i oprogramowania pozwalających na sprawne identyfikowanie i zliczanie defektów oraz zaproponował nowy zestaw potencjałów międzyatomowych dla opisu zjawisk w metalach o strukturze BCC. W szczególności w zgłoszonym cyklu prac:

1. Opisane zostały wyniki symulacji przeprowadzonych w celu zrozumienia procesu oddziaływania deuteru na powierzchnie amorficznego węgla domieszkowanego litem i borem oraz wyjaśnienie wyników eksperymentów wykonanych w National Spherical Torus Experiment na Uniwersytecie w Princeton. W trakcie symulacji modelowano procesy reakcji chemicznych związanych z mechanizmem zatrzymywania D w obecności tlenu przy pomocy klasycznej dynamiki molekularnej z wykorzystaniem potencjałów reaktywnego pola sił.
2. Dr Dominguez zaproponował i opracował nową metodę pozwalającą identyfikować i przeliczać defekty radiacyjne w materiałach. Metoda ta opiera się na śledzeniu tzw. charakterystycznych cech (fingerprints) reprezentujących lokalne zmiany konfiguracji atomu. Metoda ta pozwala w lepszy sposób, w porównaniu do innych używanych metod, identyfikować konfiguracje defektów o dużym stopniu zniekształcenia. Pozwala w sprawniejszy, zautomatyzowany sposób opisywać defekty i kaskady wybiciowe w materiałach krystalicznych. Opracowane zostało odpowiednie oprogramowanie i udostępnione dla wszystkich zainteresowanych pod nazwą Fingerprinting and Visualization Analyzer of Defects (FaVAD).
3. Zostało ono zastosowane przez dr. Domingueza do badania kaskady wybiciowej powstającej w Fe o strukturze BCC na skutek oddziaływania powierzchni z atomami o energii 10keV. Także do badania wpływu napromieniowania deuterem oraz do opisu efektów bombardowania neutronami próbek wolframu. Użyto też uczenia maszynowego dla zoptymalizowania potencjałów międzyatomowych. Pokazano, że do opisu silnie uszkodzonego materiału lepiej nadają się potencjały wytrenowane do modelowania fazy ciekłej. Opisano tworzenie się defektów w postaci atomów międzywęzłowych, wakansów oraz par Frenkla.
4. Opisane zostało powstawanie kaskad wybiciowych w Mo. Pokazano, że obok par Frenkla powstają aglomeraty bardziej złożonych defektów. Opisano przejście pomiędzy fazami naddźwiękową oraz soniczną.
5. Badano stabilność termomechaniczną molibdenu. Przeprowadzono symulacje wpływu wysokiej temperatury na odkształcenie plastyczne monokrystalicznego Mo w trakcie

badan metodą nanowgniatania. Pokazano że twardość kryształu związana jest ze zjawiskiem tworzenia się węzłów dyslokacji w kierunku [001]. Powiązano kinetykę dyslokacji w tym materiale z bardzo dobrymi własności Mo z punktu widzenia zastosowań w ekstremalnych warunkach.

Przedstawione przez habilitanta prace są metodologicznie spójne. Ich wyniki są oryginalne i wpisują się w intensywne badania dotyczące własności materiałów poddanych wysokim temperaturom, odkształceniom i napromieniowaniu. Z oświadczeń współautorów zgłoszonych prac wynika, że opisane tam wyniki teoretyczne osiągnięte zostały w znacznym stopniu samodzielnie przez dr. Domingueza. Jest też jednym z głównych twórców oprogramowania FaVAD. Dr Dominguez był członkiem komitetów organizacyjnych dwu międzynarodowych konferencji. Zdobywał fundusze na badanie i pobyty naukowe między innymi w Alexander von Humboldt Foundation, Carl Friedrich von Siemens Foundation oraz IAEA Crowdsourcing Challenge for Materials. Regularnie publikuje wyniki swoich badań w uznanych międzynarodowych czasopismach naukowych. Jest autorem 34 publikacji w dobrych i bardzo dobrych międzynarodowych czasopismach. Są one cytowane 165 razy. Poza pracą w NCBJ współpracuje obecnie z Instytutem Podstawowych Problemów Techniki PAN, Politechniką Warszawską, Instytutem Fizyki Plazmy Maxa Plancka, Uniwersytetem Tennessee w Knoxville, Forschungszentrum Jülich i Uniwersytetem w Helsinkach.

Podsumowując przedstawione przez dr Domingueza Gutierrez osiągnięcie, jego ogólny dorobek naukowy oraz dużą samodzielność, uważam, że spełnia on ustawowe i zwyczajowe wymogi warunkujące nadanie stopnia doktora habilitowanego. Wnioskuje więc o dopuszczenie go do dalszych etapów postępowania.

Ryszard Buczko