

Opinia w postępowaniu habilitacyjnym w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego dr. Francisco Javier Dominguez Gutierrez

Podstawą do przeprowadzenia postępowania habilitacyjnego jest osiem prac [1,2,3,4,5,6,7,8] zgłoszonych we wniosku dr. Domingueza. W przedstawionym do oceny cyklu prac można zauważyć znaczną ewolucję wiedzy Habilitanta w zakresie modelowania uszkodzeń materiałów. Jego podejście do modelowania uszkodzeń zmienia się diametralnie od pierwszych prac [1,2] opublikowanych w 2017 do ostatnich z wymienionych prac opublikowanych w dwóch ostatnich latach [7,8].

Pierwsze dwie prace [1,2] w zasadzie nie dotyczą modelowania defektów w materiałach. Samo słowo *defect* nie pojawia się w nich w ogóle, jest ono zastąpione bardziej ogólnym określeniem *damage*. Prace te dotyczą modelowania formowania się wiązań deuteru odpowiednio z atomami Li, C, O i atomami B, C, O. W pracy [1] pierwiastki Li, O i C dobrane zostały w proporcjach niestechiometrycznych 2:2:6. Zgodnie z wiedzą recenzenta żadna struktura Li-C-O nie krystalizuje w takich proporcjach, porównaj np. <https://materialsproject.org/materials?chemsys=C-O-Li>. Zważywszy przy tym, że rozmiar komórki perodyczności w pracach [1,2] wynosił $2 \times 1.7 \times 1.7$ [nm] oznaczało to prawdopodobnie, że w w/w komórkach, z racji narzuconych warunków perodyczności, niemożliwe było powstanie jakiegokolwiek struktury krystalicznej na drodze stabilizowania układu metodami dynamiki molekularnej.

W kryształach, szczególnie w niskich temperaturach, deformacja plastyczna jest związana z ruchem dyslokacji, które formują inne defekty rozciągliwe (extended defects), takie jak: nisko- i szerokokątowe granice ziarn oraz błędy ułożenia. W czasie krystalizacji powstają również defekty rozciągliwe o dodatkowych cechach geometrycznych, jak np. granice antyfazowe czy granice koincydentne. Obiekty tego typu spełniają dalekozasięgowe uporządkowanie. Jedną z ich podstawowych cech jest to, że, ze względu na wymaganą zgodność geometryczną, defekty takie nie mogą kończyć się (bezdefektowo) wewnątrz uporządkowanej struktury krystalicznej. Tego typu charakter defektów rozciągliwych utrudnia ich identyfikację za pomocą deskryptorów opartych na analizie lokalnego uporządkowania atomów w obszarze o wymiarach kilku czy kilkunastu stałych sieciowych [1,2,3,4]. Sama idea zastosowanego w w/w pracach wektora deskrypcji wywodzi się z opisu rozkładu gęstości kątowej sąsiednich atomów indeksowanej z wykorzystaniem kulistych

funkcji harmonicznych (solid harmonics). Zastosowanie w pracach [3,4,5,6,7] potencjału opartego na regresji gaussowskiej (GAP) jest związane z wykorzystaniem techniki smooth overlap atomic positions (SOAP). Daje ono możliwość fitowania energii potencjału do energii dowolnych konfiguracji atomów z wykorzystaniem funkcji harmonicznych dostatecznie wysokiego rzędu, które z założenia mają zapewniać dokładność modelowania. Takie podejście pozwala na indeksację otoczenia danego atomu widzianego przez pryzmat gęstości kątowej jego sąsiadów. Nadaje się ono bardzo dobrze do opisu gęstości defektów międzywęzłowych i klastrów atomów o wymiarach porównywalnych ze stałą sieciową. Z drugiej strony, z punktu widzenia kątowego rozkładu gęstości atomów trudno jest cokolwiek powiedzieć o energii tzw. extended defects oraz o siłach rządzących ruchem defektów rozciągliwych, w tym wewnętrznym uporządkowaniem ich rdzeni. Uporządkowanie to zależy zwykle od tego, w którym geometrycznie miejscu sieci taki defekt się znalazł. Energia rdzenia defektu zależy więc w dużym stopniu od rozkładu energii sprężystej zmagazynowanej w całym obszarze odkształconym sprężycie przez defekt. Ogranicza to możliwości fitowania potencjałów typu GAP do energii defektów rozciągliwych [3,5,7,8]. Warto tu jednak podkreślić, że napromieniowywanie i bombardowanie materiałów izotopami wodoru, którym poświęcone są pierwsze prace [1,2,4,7], jest związane z formowaniem się głównie defektów punktowych, które ograniczają ruch dyslokacji, co z kolei ogranicza deformację plastyczną powodując zjawisko kruchości, m.in. znane zjawisko kruchości wodorowej metali i ich stopów. Kluczowa rola, jaką pełnią defekty międzywęzłowe dla oceny trwałości materiałów stosowanych w energetyce jądrowej, tłumaczy skupienie się Habilitanta w pierwszych pracach na rozpoznawaniu i klasyfikacji defektów punktowych — w tym, na analizie powstawania wiązań deuteru z atomami litu, boru, tlenu i węgla.

Habilitant wniósł znaczny wkład w rozwój oprogramowania do modelowania atomistycznego i do wizualizacji defektów. Jest współautorem programu o nazwie Fingerprint and Visualization Analyzer of Defects (FaVAD) [3,4,6,7] służącego do rozpoznawania i wizualizacji defektów. Program ten wykorzystuje procedury zaczerpnięte z wolnego oprogramowania. W tym wypadku Habilitant musiał wykazać się zdolnościami programistycznymi i profesjonalną znajomością zaawansowanego oprogramowania do wizualizacji zdeformowanych struktur atomów. Programy tego typu mają obecnie coraz większe znaczenie dla rozwoju pre i post-processingu w modelowaniu atomistycznym. Ważną częścią dorobku naukowego Habilitanta jest wykorzystanie uczenia maszynowego [3,5,7] do parametryzacji potencjałów atomowych tworzonych na gruncie sztucznej inteligencji. Wykorzystanie metody regresji gaussowskiej, wyznaczenie wektora cech ("deskryptora") dla otoczenia atomów, a następnie ich grupowanie poprzez progowanie PCA do redukcji wymiaru wektora cech jest ciekawą, ważną i coraz częściej stosowaną alternatywą w stosunku do opisu energii konfiguracji atomów za pomocą klasycznych potencjałów opartych bezpośrednio na wiedzy z zakresu krystalografii, mechaniki klasycznej, chemii i fizyki kwantowej.

Jak wspominałem na początku recenzji, w kolejnych pracach można dostrzec ewolucję zainteresowań Habilitanta w kierunku modelowania defektów typu extended defects, w tym dyslokacji [8]. Ta ewolucja świadczy o zdolnościach i predyspozycjach do konsekwentnego eksplorowania krok po kroku kierunku zainteresowań jakim dla dra Domingueza stała się teoria defektów.

Dane bibliometryczne Zgodnie z bazą ORCID (SCOPUS) dr Dominguez jest autorem lub współautorem 30 prac, w tym 29 artykułów w czasopismach i jednego rozdziału książki z serii *Advances in Quantum Chemistry*. W większości (!) tych prac Habilitant jest pierwszym autorem. Jego indeks Hirscha wynosi 8 (Scopus), wg. w/w bazy prace te były cytowane 160 razy.

Współpraca naukowa Na uwagę zasługuje zdobyte doświadczenie związane z pracą w wielu różnych ośrodkach naukowych na świecie, w tym udokumentowana wspólnymi publikacjami współpraca ze znanymi na świecie ośrodkami z zakresu atomistycznego modelowania, takimi jak:

- Uniwersytet Helsiński w Helsinkach (prof. Kai Nordlund),
- Instytut Fizyki Plazmy Maxa Plancka w Garching (dr Udo von Toussaint),
- Stony Brook University w Nowym Yorku (prof. Predrag Krstic).

Wniosek końcowy

Doświadczenie i dorobek naukowy Habilitanta w zakresie atomistycznego modelowania materiałów, w tym modelowanie defektów w materiałach stosowanych w energetyce jądrowej, jest znaczący dla rozwoju metod atomistycznego modelowania w Polsce.

Zdaniem recenzenta wniosek w pełni zasługuje na nadanie dr. Francisco Javier Dominguez Gutierrez stopnia doktora habilitowanego. Wnoszę jednocześnie o udzielenie Habilitantowi wyróżnienia za recenzowane osiągnięcie naukowe.