



dr hab. inż. Marcin Buchowiecki, prof. US

Szczecin, 14.11.2023

Instytut Fizyki

Uniwersytet Szczeciński

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Michała Komorowicza „High-temperature corrosion of ceramic construction materials for Dual Fluid Reactor”**

Rozprawa doktorska zatytułowana „High-temperature corrosion of ceramic construction materials for Dual Fluid Reactor” opisuje badania korozji materiałów planowanych do użycia w reaktorze dwupłynowym przeprowadzone metodami modelowania molekularnego. Wyniki badań na których opiera się praca, zostały opublikowane w jednym recenzowanym artykule naukowym, doktorant jest pierwszym autorem tej pracy.

Ogólna ocena układu i zawartości pracy.

Rozprawa składa się z pięciu rozdziałów, które poza ogólnym wstępem opisują reaktor dwupłynowy i zjawiska w nim zachodzące. Jedyne jeden rozdział opisuje badania przeprowadzone przez doktoranta, jeżeli celem rozprawy doktorskiej jest rozwiązanie problemu naukowego (a nie napisanie monografii na temat interesujący doktoranta), trzeba to uznać za niewłaściwą proporcję.

W szczególności rozdział 5 opisuje budowę i działanie mikro-demonstratora dla reaktora dwupłynowego. Tak szczegółowy opis nie pasuje do reszty pracy ani jej tematyki, wystarczyłaby informacja, że takie urządzenie jest budowane z opisem tylko aspektów związanych z korozją. Zgodnie z opisem celu pracy i informacją, że jest ona oparta na jednej publikacji, wnioskuję, że autor nie bierze udziału w opracowywaniu koncepcji ani też w budowie tego urządzenia. Rozdział ten nie jest więc opisem badań autora (jeżeli jest inaczej, autor nie podaje tej informacji) ani nie jest

wstępem, stwierdzam więc, że nie pasuje do reszty pracy oraz prawdopodobnie został dodany w ostatniej chwili do gotowej już rozprawy, ponieważ nie wspomina o nim wstępny opis całości pracy (1.4 Outline).

Podsumowując, korzystniejsze dla całości pracy byłoby połączenie rozdziałów drugiego i piątego oraz ich skrócenie.

Powinien także znaleźć się w rozprawie rozdział opisujący podstawy teoretyczne przeprowadzonych symulacji – najważniejsza część pracy jest mniej uporządkowana i klarowna niż części pracy dotyczące reaktora. Brakuje ogólnego opisu działania użytych programów, podsumowania parametrów (czasem nie są podane w ogóle, co uniemożliwia powtórzenie obliczeń), które trzeba było ustalić i wyjaśnić dlaczego przyjęto takie a nie inne wartości oraz ogólnego wstępu opisującego co zostanie zrobione i dlaczego. Przez te braki dość trudno czyta się tą najważniejszą część pracy.

#### Ocena przeprowadzonych badań.

Wspomniane wcześniej uwagi dotyczą prezentacji badań i aspektów formalnych. Jeżeli chodzi zaś o same badania, to odpowiadają one właściwie celowi pracy i pokazują jaka jest degradacja powierzchni materiału i opisują w sposób ilościowy dyfuzję atomów ołowiu w materiale. Autor cytuje w rozprawie literaturę zagadnienia (symulacje przeprowadzono zgodnie z metodologią tych publikacji) i wnosi swój własny wkład w aspekty takie jak dobór oddziaływań między atomami i porównuje wyniki z różnych symulacji tzn. Quantum Espresso i LAMMPS. Dobór samych narzędzi do symulacji także jest właściwy, zgodny ze najnowszą literaturą badań materiałów ceramicznych; zwraca jednak uwagę to, że w części opisującej Quantum Espresso są cytowane prace opisujące podobne badania, ale część opisująca symulacje z użyciem LAMMPS zupełnie nie cytuje podobnych badań (cytowania dotyczą tylko doboru potencjałów międzyatomowych; opis badań i wykonanie symulacji pozwala domniemywać, że autor jednak z podobnymi pracami musiał się zapoznać). Docenić należy to, że symulacje modelują układ w stosunkowo długim czasie (4 nanosekundy).

Autor przedstawia też dobre uzasadnienie tego, że użyto materiału opartego na węglu krzemu. Szczegółowe uwagi i pytania do symulacji oraz innych aspektów rozprawy umieszczam poniżej.

#### Szczegółowe uwagi i pytania.

- Stosowana jest nietypowa notacja dla masy atomowej  $U^{233}$ .
- Wspomniano, że ołów chroni przed promieniowaniem, ale nie jest jawnie przedyskutowane czy w rozważanym reaktorze dwupłynowym stopień ochrony jest wystarczający do zaniechania wpływu promieniowania na materiał.
- Na stronie 25 mowa jest o tlenie w formie molekularnej i jonowej; najprawdopodobniej autor miał na myśli formę atomową a nie jonową.
- Strona 34 – pomocne były by rysunki przedstawiające geometrię symulowanych układów.
- Strona 34 – mixing factor nie jest zdefiniowany ani przyjęta wartość nie jest uzasadniona.
- Strona 35 – nie wyjaśniono czym jest k-point sampling (część pracy opisująca badania własne doktoranta powinna zawierać jak najpełniejszy opis tego co zrobiono, jak i dlaczego).
- Strona 35 – rozważane są różne pokrycia powierzchni adsorbowanymi atomami bez wyjaśnień jakie byłoby właściwe dla omawianej sytuacji.
- Obliczenia struktury pasmowej nie są omawiane w kontekście korozji, czy wykonanie tych obliczeń coś wnosi do problemu omawianego w rozprawie?
- Strona 45 – w opisie potencjału powinny być podane wartości parametrów, najlepiej w tabeli. Dokładna postać potencjału jest jedną z najważniejszych informacji, na której oparta jest praca.
- Strona 46 – autor wspomina o konfliktach z innymi potencjałami opisującymi oddziaływanie Pb-Pb bez żadnej konkretnej informacji o czym jest mowa. Ponownie mamy tu niekompletność opisu w najważniejszej części rozprawy.
- Poza zastosowaną regułą mieszania Lorentza-Berthelota dla potencjału Lennarda-Jonesa (pochodzącą jeszcze z XIX wieku), można było spróbować użyć innych reguł, chociażby dla

sprawdzenia na ile wyniki różniłyby się. Ponownie, w tekście brakuje informacji o wartościach parametrów potencjału Lennarda-Jonesa.

- Strona 47 – minimalizując energię w programie LAMMPS, można by było zweryfikować jakość użytego potencjału Lennarda-Jonesa przez ilościowe porównanie struktury minimum z obliczeniami Quantum Espresso – taka ilościowa informacja (razem z uwagą w poprzednim punkcie) pozwoliłaby ilościowo oszacować niepewność wyników oraz sprawdzić czy są właściwe jakościowo. Przy dużej niepewności oddziaływań użytych w dynamice molekularnej byłoby to istotne wzbogacenie wykonanych badań. Praca omawia temat jedynie jakościowo.
- Można było rozważyć użycie czy omówić możliwość użycia innych potencjałów niż Tersoffsa jak np. potencjału Coulomba-Buckingham, które także używane są do symulacji materiałów ceramicznych w programie LAMMPS.
- Nie podano kroku czasowego w algorytmie Verleta, w jednej ze znalezionych przez mnie prac (<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0272884217325865>) jest to  $10^{-4}$  ps przy czasie symulacji 50 ps.
- Strona 47 – skoro wykryto w symulacji znaczne zniekształcenia powierzchni, można było podać ilościową informację np. jak duże jest zniekształcenie w stosunku do długości wiązań.
- Strona 49 – symulacje dyfuzji atomów ołowiu, czy możliwa byłaby symulacja jak atomy ołowiu wnikają z powierzchni do wnętrza kryształu?
- Strona 50 – użyto w symulacji 0.5% wakacji, jakie jest uzasadnienie tego wyboru? (kolejna wartość, której użycie nie zostało uzasadnione w pracy)
- Rysunek 19 – niewielka liczba obliczonych punktów nie daje pewności, że zależność faktycznie jest liniowa. Jeżeli jednak podobne badania potwierdzają zależność liniową (należałoby to sprawdzić, w tym fragmencie tekstu nie ma żadnych cytowań literatury), tracimy pewność, że symulacja odzwierciedla tę zależność.
- W podsumowaniu wspomniane jest, że wstępnie utlenianie oraz zastosowanie powłok ochronnych są sposobami na ograniczenie korozji, jednak nie przeprowadzono symulacji uzasadniających tą tezę. Twierdzenia te, mimo swojej prawdziwości, nie są zatem wnioskami



z przeprowadzonych badań. Przeprowadzenie symulacji także w obecności atomów tlenu znacznie wzbogaciłoby pracę i prawdopodobnie pozwoliłoby oprzeć rozprawę na dwóch publikacjach. Rozważania termodynamiczne nie opisują degradacji materiału w skali atomowej.

Podsumowując, autor rozprawy prezentuje odpowiednią wiedzę w dyscyplinie nauki fizyczne, która pozwoliła mu rozwiązać problem naukowy, jakim jest zbadanie wpływu atomów ołowiu na badane powierzchnie. Odpowiednie wybranie obiektu badań, zbadanie ich własności i widoczna znajomość odpowiedniej literatury wskazuje na umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej - pomimo problemów z odpowiednim zaprezentowaniem swojej pracy problem naukowy został rozwiązany. Oceniam, że praca spełnia wymogi „Ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki” i wnoszę o dopuszczenie kandydata do kolejnych etapów postępowania w przewodzie doktorskim.