

Warszawa, dn. 18.11.2023

Dr hab. inż. Rafał Laskowski, profesor uczelni
Politechnika Warszawska
Wydział Mechaniczny Energetyki i Lotnictwa
Instytut Techniki Ciepłej
ul. Nowowiejska 21/25, 00-665 Warszawa
e-mail: rafal.laskowski@pw.edu.pl

Recenzja Rozprawy Doktorskiej mgr inż. Michała Komorowicza

“High-temperature corrosion of ceramic construction materials for Dual Fluid Reactor”

Recenzja została opracowana na podstawie zlecenia wystawionego przez Narodowe Centrum Badań Jądrowych (NCBJ) z siedzibą w Otwocku adres: ul. Andrzeja Sołtana 7.

Przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska została przygotowana pod kierunkiem Prof. dr hab. Konrada Czernskiego i promotora pomocniczego Dr Kazimierza Skrobasa.

1. Ogólna charakterystyka rozprawy doktorskiej

Rozprawa doktorska została napisana w języku angielskim w ramach projektu PhD4GEN. Tytuł rozprawy doktorskiej to "High-temperature corrosion of ceramic construction materials for Dual Fluid Reactor". Doktorant w pracy skupia się na korozji węgla krzemu na skutek oddziaływań z ołowiem. Węgiel krzemu ma być materiałem zastosowanym do budowy rdzenia reaktora Dual Fluid Reactor (DFR) a ciekły ołów ma być zastosowany jako chłodziwo.

Rozprawa doktorska zawiera spis literatury, wykaz rysunków, wykaz skrótów, streszczenie po polsku i angielsku, cel i motywację pracy, przedstawienie sposobu rozwiązania zagadnienia, wyniki i wnioski oraz spis literatury. W spisie literatury znajduje się sto sześćdziesiąt sześć pozycji, co świadczy o bardzo dobrym wykonaniu przeglądu literatury. Rozprawa doktorska liczy siedemdziesiąt cztery strony i jest podzielona na sześć rozdziałów. Pracę można było uzupełnić o spis tabel i wykaz oznaczeń.

W rozdziale pierwszym zostały przedstawione motywacja podjęcia tematu, cele pracy, hipotezy. W rozdziale drugim została przedstawiona koncepcja reaktora DFR i własności materiałów stosowanych w reaktorze DFR. Rozdział trzeci dotyczy korozji. W rozdziale tym przedstawione są mechanizmy i czynniki wpływające na korozję. W rozdziale czwartym Doktorant przedstawia swoje własne obliczenia. Pierwsza ich część dotyczy zjawisk korozyjnych z wykorzystaniem teorii funkcjonału gęstości (DFT). Druga część odnosi się do analizy

oddziaływań układów atomowych z wykorzystaniem dynamiki molekularnej. Rozdziały trzeci i czwarty stanowią zasadniczą część analityczną pracy i zawierają szereg cennych wyników. Jedynym zauważonym mankamentem w części czwartej jest brak bezpośredniego powiązania analizowanych parametrów ze skalą czy też tempem korozji. Do obliczeń zostały wykorzystane dwa programy Quantum Espresso i LAMMPS. W rozdziale piątym został przedstawiony schemat ideowy stanowiska badawczego do przeprowadzenia w przyszłości testów korozyjnych. W rozdziale szóstym Doktorant przedstawił wnioski końcowe na podstawie przeprowadzonych przez siebie analiz.

2. Główne walory rozprawy doktorskiej

Przeprowadzenie obliczeń w programie Quantum Espresso dla węgliku krzemu i ołowiu z których wynika, że forma kubiczna węgliku krzemu jest bardziej podatna na oddziaływanie ołowiu w stosunku do innych form polimorficznych. Model statyczny wykonany w programie Quantum Espresso z wykorzystaniem teorii funkcjonału gęstości Density Functional Theory – DFT;

Z przeprowadzonych obliczeń z wykorzystaniem programu LAMMPS, poprzez symulację dynamiki molekularnej wynika, że ołów nie oddziałuje znacząco chemicznie z węglikiem krzemu (model dynamiczny -MD);

Propozycja stanowiska badawczego (pętli mikrodemonstratora) przeznaczonego do testów korozyjnych, wizualizacja stanowiska badawczego i jego komponentów, zawarta jest w rozdziale V pracy. Opisano w nim zasadnicze elementy stanowiska badawczego przedstawionego na rysunku 22. Na rysunku tym brak jest jednak wykazu elementów składowych pętli mikrodemonstratora. W rozdziale tym opisano również przygotowanie i sterowanie eksperymentem badawczym. Zabrakło tutaj wzmianki o sposobie zabezpieczeniu ciekłego ołowiu przed zestaleniem w przypadku awarii instalacji.

3. Uwagi szczegółowe do rozprawy doktorskiej i tematy do dyskusji

Z analizy rozprawy doktorskiej wynikają następujące uwagi szczegółowe i tematy do dyskusji:

1. Dlaczego został wybrany ołów jako chłodziwo? Jakie własności ołowiu zadecydowały o jego wyborze?

2. Strona 16

As a result, the reactor can be more compact and more efficient, reducing both capital and operational costs. This leads to a very high Energy Return on Investment (EROI) compared to other energy sources[2], [3].

Jest to wprawdzie teza zaczerpnięta z literatury [2],[3], ale wobec braku konkretnych realizacji reaktorów DFR – technologii nowatorskiej i skomplikowanej Autor powinien zrobić własne zastrzeżenie co do tej opinii.

Strona 17

3. This fuel then flows into hexagonally arranged fuel tubes, whose number varies depending on the configuration. Jakie są dostępne konfiguracje paliwa?

Strona 17

4. The core is surrounded by a neutron reflector made of lead, the same material used for the coolant, which also serves as a radiation shield. Czy ten ciekły ołów nie stopi reflektora z ołowiu?

Strona 24

5. Additionally, due to the high density of the metal, cavitation may also occur [52]. Czy mógłbym prosić o wyjaśnienie tego zjawiska, kawitacja towarzyszy zwykle małej gęstości płynu?

Strona 46

6. The isothermal-isobaric NPT and NVT where volume is constant, ensembles are used for control, czy można prosić o rozwinięci tych skrótów NPT I NVT?

Strona 46

7. Due to arising conflicts with other potentials, it was also used to describe Pb-Pb interactions. Czy można prosić o wytłumaczenie?

Strona 47

8. employing non-Hamiltonian equations in the Nosé-Hoover style for parameters control. Jakie parametry są kontrolowane?

Strona 58

9. flow will be forced solely by the force of natural convection. Jakie warunki muszą zostać spełnione dla force of natural convection?

Strona 64

10. Based on the gathered information, possible ways to limit corrosion have been identified: for the coolant, this involves pre-oxidation of the material and maintaining the oxygen level within an appropriately high concentration range. Prośba o skomentowanie tej opinii - zwykle wysoka zawartość tlenu zwiększa intensywność korozji a nie jej zapobiega.

4. Uwagi redakcyjne

Poniżej przedstawiam drobne sugestie redakcyjne.

Strona 14, One such unit, the double liquid metal microdemonstrator of the reactor, is the currently under development. Można było dopisać gdzie następuje rozwój tej jednostki i w jakim stanie zaawansowania się ona znajduje;

Strona 14, SiCf/SiC composite is suitable for use in the DFR reactor. Można było dopisać do czego się nadaje, do jakich konkretnie elementów reaktora;

Strona 16, reactor concept[1].; sources[2], [3]. – według mnie można by umieścić spację przed cytowaniem [1] i [2];

Strona 17 i strona 19 jest inny sposób formatowania podpisu pod rysunkiem

Figure 1: DFR fuel and cooling loop layout by [2], **Figure 2:** Single crystal cell of 3C-SiC

Strona 19 - ($\text{Wcm}^{-1}\text{C}^{-1}$) – można by użyć innego symbolu dla mnożenia;

Strona 21 (J/kgK), – proponowałbym inny zapis np. ($\text{J}/(\text{kgK})$) lub ($\text{J}/\text{kg}/\text{K}$);

Strona 21 – coolant material.[4], [42], [43]. – kropka przed [4] wydaj się być niepotrzebna;

Strona 22 – 30.54 W/mK proponowałbym zapis np. ($\text{W}/(\text{mK})$) lub ($\text{W}/\text{m}/\text{K}$);

Strona 22 - $15.91\text{g}/\text{cm}^{3[48]}$. – cytowanie z literatury numer [48] występuje jako potęga dla cm;

Strona 23 – In general, it can be assumed that *the more compact or tightly bonded materials corrode less whether they are glasses or crystalline materials* [50]. – czy czcionka italic została zastosowana w tym miejscu celowo?

Strona 33 – zależność na $E(V)$ - czy na pewno pochodna K' jest podniesiona do potęgi?

Można było więcej opisać o K i pochodnej K' . V represents volume, ale objętość czego?

Strona 34 – w opisie pod rysunkiem na końcu raz występuje kropka a innym razem jej nie ma, przykład rysunki 6 i 1 oraz 2;

Strona 39 – w opisie rysunku 9 występuje Hsi powinno być raczej HSi;

Strona 42 – na tej stronie występuje rysunek numer 13 jak również na stronie 42 również występuje rysunek numer 13;

Strona 42 – na rysunku 13 brak jest opisu na osi pionowej, oś pozioma mogła by być bardziej czytelnie opisana;

Strona 44 – $1.56[126]$. – proponowałbym spację przed cytowaniem literatury [126];

Strona 50 – $D1000^\circ\text{C} = 1.19 \times 10^{-13}$ – potęga 13 przeskoczyła do następnego wiersza;

Strona 53 – rysunek 22 – brak opisu elementów składowych na rysunku;

Strona 58 – The first one is a simple pump, like the one in the TALL 3D Figure – brakuje numeru rysunku;

Strona 61 – by using oxygen sensors and pumps [156], [157] This approach – powinna być kropka po [157].

Generalna uwaga dotyczy braku numeracji zależności występujących w rozprawie doktorskiej. Numeracja zależności pozwala między innymi w prostszy sposób odnieść się do zależności.

5. Uwagi końcowe

Na podstawie przedstawionej do recenzji rozprawy doktorskiej stwierdzam, że Pan Michał Komorowicz posiada szeroką wiedzę i umiejętność samodzielnej pracy, co pozwoliło mu przeprowadzić badania dla analizowanego zagadnienia. Nowym i oryginalnym wkładem pracy jest jedno z pierwszych badań mających na celu zbadanie korozji węgliku krzemu za pomocą ciekłego ołowiu z wykorzystaniem teorii funkcyjności gęstości (DFT) i symulacji dynamiki molekularnej (MD). Rozprawa doktorska przyczynia się do pogłębienia wiedzy oraz zrozumienia mechanizmów korozji i oddziaływania pomiędzy węglikiem krzemu i ciekłym ołowiem.

Biorąc pod uwagę wszystkie aspekty przedstawione w recenzji rozprawy doktorskiej stwierdzam, że recenzowana rozprawa doktorska spełnia wymagania, jakie Ustawa z dnia 20 lipca 2018 Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne stawia rozprawie doktorskiej.

Wobec powyższego wnioskuję o jej przyjęcie jako rozprawy doktorskiej i o jej dopuszczenie do publicznej obrony.



Dr hab. inż. Rafał Laskowski, profesor uczelni