

Prof. dr hab. Mieczysław Budzyński
Instytut Fizyki UMCS
20-031 Lublin
Pl. M. Curie-Skłodowskiej 1
e-mail: budzyn@poczta.umcs.lublin.pl

Lublin, 2014.01.07

Recenzja rozprawy habilitacyjnej dr inż. Jakuba Cieślaka "Badania fazy sigma w układach zawierających żelazo" oraz ogólna ocena dorobku naukowego habilitanta

Recenzja rozprawy habilitacyjnej

Dr inż. Jakub Cieślak jest pracownikiem Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie. Stopień doktora uzyskał w roku 1995 na podstawie rozprawy pt.: „Zastosowanie analizy harmonicznej do badania fal gęstości spinowej i ładunkowej w chromie i jego stopach”. Promotorem rozprawy był dr hab. Stanisław Dubiel.

Badaniem fazy sigma dr Cieślak zajmuje się od roku 1996. Ważne technologicznie związki Fe-Cr, Fe-V i Fe-Mo są składnikami stali stosowanymi między innymi w energetyce jądrowej i petrochemii. Związki te tworzą fazę sigma w temperaturze kilkuset stopni Celsjusza. Faza ta jest dość krucha, może przyspieszać korozję. Obecność jej powoduje obniżenie właściwości mechanicznych stali i obniża jej użyteczność technologiczną. Poznanie procesu transformacji fazy alfa do fazy sigma ma duże znaczenie dla metalurgii i inżynierii materiałowej. Faza sigma istnieje w stosunkowo wąskim przedziale stechiometrycznym oraz posiada skomplikowaną strukturę krystalograficzną.

Podobnie jak w przypadku rozprawy doktorskiej główną metodą badawczą habilitanta jest spektroskopia Mössbauera. Zwykle związki żelaza w temperaturach pokojowych są ferromagnetyczne z którymi związany jest sekstet magnetyczny. Obecność fazy sigma prowadzi do pojedynczej asymetrycznej linii (lub dubletu kwadrupolowego) w widmie Mössbauera. Prowadzi to do łatwej i nie budzącej wątpliwości wykrycia niewielkich domieszek fazy sigma. Ponadto grupa prof. Dubiela znakomicie rozwinęła programy numeryczne niezbędne do znacznie trudniejszej identyfikacji fal gęstości spinowej.

Próbki zawierające fazę sigma przygotowano tradycyjną metodą poprzez topienie i wygrzewanie (Fe-Cr, Fe-V i Fe-Re) oraz przez spiekanie proszków wysokiej czystości i hartowanie w ciekłym azocie (Fe-Mo). Jakość otrzymanych próbek sprawdzano metodą XRD. Dodatkowe pomiary przeprowadzono metodą dyfrakcji neutronów oraz jądrowego rezonansu magnetycznego (NMR).

Rozprawa habilitacyjna jest przykładem umiejętnego zastosowania zaawansowanych metod obliczeniowych z zakresu teoretycznej fizyki ciała stałego do analizy wyników pomiarów Mössbauera. Należy podkreślić, iż zarówno pomiary jak i ich interpretacja jest w dużej części rezultatem pracy habilitanta. Oczywiście w części teoretycznej korzystał on z oprogramowania, konsultacji i doświadczenia środowiska krakowskiego.

Z pięciu faz sigma w układach dwuskładnikowych zawierających żelazo przedmiotem rozprawy habilitacyjnej są cztery: Fe-Cr, Fe-V, Fe-Mo i Fe-Re. Interpretacja badań strukturalnych (dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego i neutronów) oraz Mössbauera jest trudna ze względu na skomplikowaną strukturę krystalograficzną (30 atomów rozłożonych w pięciu nierównoważnych podsieciach) oraz nieporządek chemiczny

(oba rodzaje atomów występują we wszystkich podsieciach). Oznacza to, iż widmo mösbauerowskie powinno składać się z 5 dubletów kwadrupolowych o intensywnościach proporcjonalnych do zawartości żelaza i różnych parametrach oddziaływań nadsubtelnych (IS, QS oraz G). Zakładając jedną szerokość połówkową linii G pozostaje 13 parametrów swobodnych co przy słabo rozdzielonej strukturze widma czyni praktycznie niemożliwym jednoznacznie wyznaczenie parametrów oddziaływań nadsubtelnych. W tej sytuacji w celu interpretacji zmierzonych widm mösbauerowskich dr Cieślak przeprowadził obliczenia struktury elektronowej metoda KKR. Zastosował oryginalne podejście, w którym nieporządek struktury krystalograficznej zostaje odtworzony poprzez szczegółową analizę kilkudziesięciu wybranych układów, a prawdopodobieństwo ich wystąpienia związane jest z rozkładem i ilością najbliższych sąsiadów atomów żelaza. Podejście takie umożliwia wyznaczenie gęstości ładunkowej w obszarze jądra atomów żelaza (względne przesunięcia izomerycznego) w zależności od liczby najbliższych sąsiadów żelaza w każdej z analizowanych podsieci. Znając rozkład ładunku w komórce można wyliczyć gradient pola elektrycznego i jego wartość dla każdego węzła. Takie podejście umożliwiło prawidłowe dopasowanie widma fazy sigma w stanie paramagnetycznym przy wykorzystaniu pięciu parametrów swobodnych, z których cztery zależą od warunków eksperymentu.

Zaskakującym było stwierdzenie uporządkowania antyferromagnetycznego w przypadku struktur nieuporządkowanych, występujących w fazie sigma Fe-Cr. Na podstawie obliczeń w ramach modelu AFM okazało się iż atomy chromu posiadają indukowany moment magnetyczny zorientowany przeciwnie do momentu magnetycznego atomów żelaza.

Ciekawym rezultatem jest stwierdzenie, iż w układzie Fe-V istnieje krytyczna ilość atomów Fe jako najbliższych sąsiadów, poniżej której znika polaryzacja spinowa stanów elektronowych na tym atomie, czyli traci on własności magnetyczne. Powyżej tej krytycznej ilości moment magnetyczny atomu Fe (a także V) w przybliżeniu liniowo zależy od liczby atomów Fe jako najbliższych sąsiadów. Natomiast sprawdzenia wymaga sugestia, iż w układzie Fe-V istnieją rozłączne obszary o uporządkowaniu ferromagnetycznym (FM) i antyrównoległym (APM).

Interpretację widm mösbauerowskich w układzie Fe-Mo przeprowadzono korzystając z obliczeń struktury elektronowej metodą KKR. W odróżnieniu od poprzednich układów w fazie sigma Fe-Mo nie występuje korelacja pomiędzy gęstością ładunkową na poszczególnych węzłach komórki elementarnej a liczbą sąsiadów (atomów Fe lub Mo).

W układzie Fe-Re nie stwierdzono również wyraźnej zależności gęstości ładunkowej od ilości najbliższych sąsiadów danego typu.

Dr Cieślak obliczenia struktury elektronowej wykorzystuje ponadto do analizy stabilności badanych układów oraz do oceny energii powstawania fazy sigma. Energię formowania fazy sigma traktuje jako funkcję obsadzeń poszczególnych węzłów w komórce elementarnej przez poszczególne atomy. Podobne zależności wyznaczono dla entropii konfiguracyjnej i magnetycznej. Dzięki temu możliwa była analiza energii tworzenia stopu w nieuporządkowanym chemicznie układzie z uwzględnieniem obsadzeń wszystkich pięciu podsieci przez obydwa rodzaje atomów. Obliczenia takie przeprowadzono dla układów Fe-Cr i Fe-V. Umożliwiły one wyznaczenie zależności entalpii swobodnej od temperatury dla określonego składu i obsadzenia podsieci. Minimalizacja entalpii swobodnej umożliwia wyznaczenie obsadzenia podsieci w określonej temperaturze. Rezultaty obliczeń teoretycznych zostały potwierdzone przez pomiary mösbauerowskie oraz dyfrakcją neutronów.

Rozprawa habilitacyjna opiera się na 9 pracach opublikowanych w następujących czasopismach: Phys. Rev. B – 2; J. Alloys Comp. -1; J. Phys. Condens Matter – 1; Intermetallics -3; J. Phys. Chem. Solids – 1; Mat. Chem. Phys -1.

Wyniki badań zawarte w publikacjach stanowiących podstawę habilitacji oraz inne rezultaty prac badawczych prezentowane były wielokrotnie w formie referatów na Ogólnopolskich Seminariach Spektroskopii Mössbauerowskiej w których habilitant aktywnie uczestniczył. Sposób prezentacji uzyskanych rezultatów, dyskusje oraz odpowiedzi na pytania potwierdzają znajomość problematyki naukowej oraz jego zdolność do jasnej i przekonującej prezentacji wyników.

Ogólna ocena dorobku naukowego dr inż. Jakuba Ciślaka

Dr Cieślak jest współautorem 69 publikacji naukowych w tym - 8 przed uzyskaniem stopnia doktora i 61 po uzyskaniu stopnia doktora w tym 9 stanowiących podstawę habilitacji. Wszystkie znajdują się w czasopismach o szerokim zasięgu międzynarodowym. Jest to bardzo dobry wynik. Sumaryczny impact factor według listy Journal Citation Reports (JCR), zgodnie z rokiem publikacji prac wynosi 151,4. Liczba cytowań według bazy Web of Science wynosi 342, zaś jego indeks Hirscha wynosi 11.

Dorobek naukowy dr Cieślaka, po uzyskaniu stopnia doktora nie wchodzący do rozprawy habilitacyjnej to 52 prace. Dotyczą one: badania kinetyki transformacji odwrotnej – rozpuszczania fazy sigma przez wygrzewanie, wpływu domieszek Ti i Al na tworzenie fazy sigma, badanie związków międzymetalicznych i stali, rozpadu spinodalnego, topienia mechanicznego; implantowanych, napromieniowanych jonami i wodorowanych metali oraz próbek geologicznych i związków biologicznych.

Pomiary wykonywane były metoda tradycyjnej spektroskopii ^{57}Fe , ^{119}Sn oraz metoda CEMS.

Dr Cieślak kierował jednym projektem badawczym MNiSzW oraz obecnie kieruje drugim projektem OPUS Narodowego Centrum Nauki. Oba są bezpośrednio związane z rozprawą habilitacyjną i dotyczą struktury elektronowej i oddziaływań nadsubtelnych fazy sigma w dwu i trójskładnikowych stopach żelaza.

Dr Cieślak bierze aktywny udział w międzynarodowej współpracy naukowej. Uczestniczył w realizacji 3 projektów badawczych w ramach 7 Programu Ramowego Unii Europejskiej. Odbił 11 miesięczny staż podoktorski w Instytucie Maksa Plancka w Dusseldorfie. Odbił staż naukowy w Uniwersytecie Technologicznym i Politechnice Wiedeńskiej. Uczestniczył w pomiarach neutronograficznych w ILL i ESRF Grenoble. Dr Cieślak prezentował wyniki swoich badań na 8 konferencjach międzynarodowych i 5 krajowych. Ponadto uczestniczył w 51 konferencjach międzynarodowych i 14 krajowych. Dużą rolę w tej współpracy międzynarodowej odgrywa jego bezpośredni przełożony prof. dr hab. Stanisław Dubiel.

W dostarczonej dokumentacji nie znalazłem informacji o jego działalności dydaktycznej. Działalność organizacyjna to 3-krotny udział w egzaminie maturalnym z fizyki (jako przedstawiciel AGH) połączonym z egzaminem wstępnym na wyższą uczelnię kiedy obowiązywał ten system. To stanowczo za mało na pracownika wyższej uczelni technicznej.

Był członkiem Komitetu Organizacyjnego Europejskiej Konferencji Termoelektrycznej – Kraków 2004 oraz Ogólnopolskiego Seminarium Spektroskopii Mössbauerowskiej – Koninki 2008. W ciągu 14 lat w okresie 1999–2013 otrzymał 12 nagród zespołowych Rektora AGH. Tak często (praktycznie co roku) przyznawane nagrody Rektora są wyrazem uznania środowiska naukowego AGH dla niego i całego zespołu.

Wniosek

Stwierdzam, że zarówno pod względem merytorycznym jak i formalnym przedstawiona do recenzji dokumentacja stanowiąca podstawę ubiegania się o stopień doktora habilitowanego w dziedzinie – nauki fizyczne w dyscyplinie fizyka w przewodzie habilitacyjnym dr Jakuba Cieślaka spełnia stawiane ustawowo wymogi, a osiągnięty dorobek naukowy habilitanta uzasadnia ubieganie się o stopień doktora habilitowanego nauk fizycznych w dyscyplinie fizyka. **Wysoko oceniam wyniki przedstawione w autoreferacie oraz dorobek naukowy habilitanta. Wnoszę o dopuszczenie dr inż. Jakuba Cieślaka do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.**

Biorąc pod uwagę: wyniki przedstawione w autoreferacie, przeprowadzone pomiary mössbauerowskie, umiejętnie wykonane zaawansowane obliczenia teoretycznych oraz cały dorobek naukowy stawiam wniosek o wyróżnienie rozprawy habilitacyjnej dr inż. Jakuba Cieślaka.

M. S. Sadowski