



AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

Wydział Inżynierii Metali i Informatyki Przemysłowej

Al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków
Tel: +48 (12) 617 51 54
Fax: +48 (12) 617 29 21

AGH

dr hab. inż. Łukasz Madej, prof. AGH

e-mail: lmadej@agh.edu.pl

Kraków 21.08.2018

Recenzja rozprawy doktorskiej:

Wieloskalowe modelowanie przewodnictwa cieplnego kompozytów metal – grafen

Autor rozprawy: mgr inż. Mateusz Grybczuk

1. Przedmiot oceny

Przedmiotem recenzji jest rozprawa doktorska składająca się ze wstępu, pięciu rozdziałów, podsumowania oraz zestawu pięciu załączników stanowiących materiał uzupełniający. Autor kończy rozprawę wykazem literatury zawierającym 102 prace, z których 36 opublikowano w okresie ostatnich pięciu lat. W przeglądzie literatury znajduje się wiele pozycji o podstawowym znaczeniu w obszarze poruszanych zagadnień. Taki dobór literatury wskazuje na aktualność poruszanej tematyki badawczej, ale równocześnie odnosi się do prac znaczących w dziedzinie.

Problematyka rozprawy doktorskiej dotyczy modelowania numerycznego przewodności cieplnej kompozytu grafenu w osnowie miedzi w zależności od charakterystycznych cech jego budowy mikrostrukturalnej. Wybrana do analizy grupa materiałów stanowi bardzo interesujące rozwiązanie dla poprawy przewodności cieplnej, szczególnie w materiałach dedykowanych do zastosowań w przemyśle elektronicznym. W tym przypadku, postępująca miniaturyzacja wytwarzanych urządzeń stanowi czynnik stymulujący rozwój nowych materiałów spełniających wygórowane wymagania konstrukcyjne.

Warto podkreślić, iż prace prowadzone w tym obszarze, zarówno w kraju jak i za granicą, dostarczają wyników publikowanych w czasopismach naukowych o uznanej międzynarodowej renomie. Zatem recenzowana praca wnosi wkład w obszar laboratoryjnych oraz numerycznych badań nad projektowaniem kompozytów miedz-grafen o wymaganych własnościach przewodności cieplnej.

2. Ocena pracy doktorskiej

W pierwszej części pracy Autor przedstawił stosunkowo obszerne wprowadzenie w ogólne zagadnienia odnośnie kompozytów z wypełniaczami węglowymi a w szczególności z odmianą alotropową węgla jaką jest grafen. Opisane zostały podstawowe metody wytwarzania tego typu kompozytów oraz zależności pomiędzy ich budową a wpływem na własności cieplne. Przedstawiono także stosowane w literaturze metody analizy przewodności cieplnej wykorzystywane w badaniach laboratoryjnych oraz o charakterze modelowania numerycznego. Szczególnie te drugie są istotne z punktu widzenia recenzowanej rozprawy. Wartościowym elementem tej części pracy jest próba krytycznego podejścia do możliwości wykorzystania dostępnych metod pomiarowych. Niestety wybór metod numerycznych stosowanych do wspomaganie określania własności cieplnych jest dość ograniczony i skupia się na metodzie dynamiki molekularnej, metodach analitycznych oraz metodzie elementów skończonych. Uogólnienie i uzupełnienie tego rozdziału o metody analizy wykorzystujące dyskretyzacje domeny obliczeniowej w formie siatki czy chmury punktów porządkowałoby przedstawione wiadomości. Istotna kwestia określania minimalnych rozmiarów modeli obliczeniowych oraz stosowania tzw. okresowych warunków brzegowych zostały potraktowane bardzo skrótowo. Część z tych informacji jest jednak powtórzona i rozszerzona w kolejnym rozdziale trzecim, który jest bezpośrednio dedykowany zagadnieniom modelowania numerycznego przewodności cieplnej w materiałach kompozytowych.

Tutaj ponownie omówiono wspomniane podejścia bazujące na dynamice molekularnej, modelach analitycznych i metodach bazujących na teorii ośrodków ciągłych. Przegląd literatury jest dość obszerny i przedstawia postęp w zakresie wykorzystania tych metod obliczeniowych w poruszanych zagadnieniach. Nie jest jednak jasne dlaczego nie połączono rozdziałów 2.2.3 i 3 w jedną spójną całość. W rozdziale tym Autor wskazuje również na możliwość uwzględnienia w modelowaniu numerycznym wpływu cech morfologii mikrostruktury materiału kompozytowego z uwzględnieniem jego niejednorodności. To zagadnienie jest niezmiernie interesujące, jednak Autor nie przedstawił stanu wiedzy literaturowej z obszaru metodyki stosowanej do uzyskiwania takich cyfrowych reprezentacji mikrostruktury, pomimo, iż takie podejścia stosuje w drugiej części rozprawy. Cennym elementem jest natomiast podsumowanie przeprowadzonego przeglądu literatury, w którym jednoznacznie wskazano pewne ograniczenia stosowanych podejść, które to stały się motywacją do podjęcia niniejszej pracy.

Cel pracy znajduje się w rozdziale czwartym i zakłada analizę z wykorzystaniem modeli numerycznych, wpływu mikrostruktury kompozytów metal-grafen na ich przewodność cieplną. W tej części brakuje jednak takich elementów jak teza rozprawy czy cele szczegółowe, o których Autor wspomina w kolejnych rozdziałach. Te informacje ułatwiłyby czytelnikowi zrozumienie zakresu i schematu postępowania w realizacji pracy. Nie jest również jasne co Autor rozumie pod stwierdzeniem z ostatniego punktu niniejszego rozdziału tj. „uwzględnienie w modelu innych cech struktur materiałów możliwych do wytworzenia dostępnymi technologiami”.

Kolejny rozdział, piąty, poświęcony został omówieniu metodyki badawczej wykorzystanej w trakcie zrealizowanych badań. Autor zdecydował się na wykorzystanie w modelowaniu numerycznym rozwiązania stanowiącego podejście o charakterze wieloskalowym niesprzężonym. W tym przypadku informacje z niższych skali wymiarowych, wykorzystywane

są jako dane wejściowe do rozwiązywania zagadnienia w wyższych skalach jednak bez uwzględnienia sprzężenia zwrotnego. Taki dobór metody do analizowanego zagadnienia jest jak najbardziej poprawny i zgodny z coraz częściej wykorzystywaną metodyką ICME (ang. Integrated Computational Material Engineering). Dodatkowo niektóre z parametrów opracowanego modelu zostały zaczerpnięte z wyników badań literaturowych.

Opracowane podejście numeryczne zostało zweryfikowane głównie z wykorzystaniem pomiarów dostępnych w literaturze, ale również dostępnych rozwiązań analitycznych czy badań zrealizowanych w Instytucie, z którym doktorant jest bezpośrednio związany.

W pracy jako podstawowe narzędzie do określenia własności badanych układów międz-grafen w skali atomowej wybrano metodę dynamiki molekularnej i program LAMMPS. Z wykorzystaniem tej techniki przeprowadzono obliczenia umożliwiające określenie przewodności cieplnej granic międz-grafen. W tym etapie pracy Autor zaproponował również skrypt do automatycznej generacji badanych układów warstwowych dedykowany dla programu LAMMPS, który został opisany w jednym z załączników.

Te badania zostały uzupełnione poprzez opracowanie modeli analitycznych dla kompozytów warstwowych o poprzecznym i wzdłużnym układzie warstw. Ponownie interesujące szczegóły zaproponowanego podejścia zostały przeniesione do załącznika.

W ostatniej części omawianego rozdziału zaprezentowano opracowany, najbardziej złożony model numerycznych bazujący na bezpośredniej reprezentacji mikrostruktury badanego kompozytu wprowadzonej w struktury komercyjnego programu metody elementów skończonych ANSYS. W pierwszym etapie Autor opisał procedurę generacji cyfrowych modeli mikrostruktur miedzi z elementami reprezentującymi warstwę grafenu. W trakcie badań wykorzystano podejście teselacji Laguerre-Voronoi. Nie jest jednak sprecyzowane czy Autor samodzielnie opracował implementację wspomnianego algorytmu czy wykorzystał dostępny już program komputerowy. W trakcie badań opracowano kilka wersji cyfrowych modeli badanych układów międz-grafen: polikrystaliczny z jednorodnym rozmiarem ziaren miedzi, polikrystaliczny z anizotropowym rozkładem wielkości ziaren oraz o tzw. całkowitej orientacji płatków grafenu. W każdym przypadku na wybrane granice uzyskanych teselacji wprowadzono elementy reprezentujące wymagane pokrycie granic ziaren grafenem.

Dodatkowo w celu przyspieszenia realizacji obliczeń numerycznych opracowanymi modelami doktorant zdecydował się wykorzystać do opisu struktur reprezentujących grafen elementy typu shell w przeciwieństwie do stosowanych przy dyskretyzacji osnowy z miedzi elementów typu solid. Takie rozwiązanie należy uznać za nowatorski i twórczy element niniejszej pracy. Autor potwierdził poprawne działanie modelu porównując uzyskane wyniki z wynikami obliczeń modelem analitycznym dla uproszczonego układu warstw. Brakuje jednak w dyskusji jednoznacznego zaprezentowania przewagi elementów typu shell i solid w redukcji czasu obliczeń. Taka analiza, ponownie dla uproszczonego układu warstw w kompozycie byłaby wartościowym uzupełnieniem dyskusji. Opis opracowanego podejścia generacji elementów typu shell został skrótowo zamieszczony w załączniku pracy.

Omawiany rozdział stanowi przedstawienie głównych osiągnięć twórczych doktoranta. Jednak w opinii recenzenta wykorzystany schemat, w którym wiele interesujących informacji zostało umieszczonych nie w jego tekście, a w załącznikach utrudnia lekturę. W obecnej postaci rozdział ten ma cechy raczej raportu niż rozprawy doktorskiej nad opracowanymi,

wartościowymi autorskimi rozwiązaniami algorytmicznymi.

Zaproponowane modele numeryczne zostały następnie wykorzystane w serii analiz numerycznych wpływu budowy i jej niejednorodności na uzyskiwane wartości współczynników przewodności cieplnej. Ten rozdział stanowi niezmiernie cenny element pracy, ponieważ pokazuje podstawową zaletę wsparcia badań o charakterze laboratoryjnym poprzez modelowanie komputerowe. Z wykorzystaniem opracowanych modeli doktorant przeanalizował szerokie spektrum parametrów badanych kompozytów, które jest trudne do osiągnięcia na drodze badań laboratoryjnych. Uzyskiwane wyniki interpretował w odniesieniu do pomiarów oraz prac literaturowych i potwierdził wysokie możliwości właściwego przewidywania zachowania się takich układów w trakcie przepływu ciepła. W tej części nie jest jednak wyjaśnione dlaczego Autor nie rozszerzył badań np. o uwzględnienie porowatości, o której sam wspominał, iż może mieć istotne znaczenie na uzyskiwane wyniki. Zaproponowane podejście jest wręcz predystynowane do realizacji tego typu analiz. Pewien niedosyt pozostawia brak opisu w rozprawie kwestii związanych z układem przestrzennym warstw w modelu dynamiki molekularnej, doktorant w tym przypadku odnosi się jedynie do informacji zaprezentowanych w jednej ze swoich publikacji.

Ogólne podsumowanie całości pracy i wyciągnięte wnioski znajdują się w ostatnim, siódmym, rozdziale pracy.

3. Uwagi szczegółowe

Praca napisana jest starannie z zachowaniem standardów tekstu naukowo-technicznego, cechuje się dokładnością wykonanych rysunków i ilustracji. W pracy występują jednak dość liczne drobne błędy gramatyczne i edytorskie np. powtórzenia, kropki w niewłaściwych miejscach, duże odstępy między rysunkami, nieczytelna skala na niektórych rysunkach np. rysunku 6.19, niespójny zapis nazw czasopism w rozdziale z literaturą np. skróty lub pełne nazwy itp.

4. Uwagi dyskusyjne

Proszę przedstawić wyjaśnienia następujących kwestii w formie pisemnej:

- jakie są metody badawcze umożliwiające uzyskanie przestrzennych danych na temat budowy mikrostruktury badanych kompozytów metal-grafit?
- dlaczego zdecydowano się wybrać metodę teselacji Laguerre-Voronoi do uzyskania cyfrowej reprezentacji mikrostruktury badanego kompozytu. Jakie inne metody numeryczne można wykorzystać aby odwzorować kształt elementów z rys. 5.5?
- czy jest możliwość realizacji obliczeń dla prostego przypadku testowego układu kompozytu warstwowego, w którym do dyskretyzacji warstwy grafenu zostaną wykorzystane elementy typu solid a następnie typu shell?
- nie jest jasne, które z zaprezentowanych w rozdziale 6 wyników dotyczą rozdziału 5.3.2.
- co jest rozumiane pod stwierdzeniem „geometria równowagowa”?
- dlaczego w przypadku dyskusji ze strony 58, nie zdecydowano się na zrealizowanie obliczeń numerycznych dla większej liczby warstw?

- dlaczego weryfikację z rozdziału 6.2.3 przeprowadzono na materiale uzyskanym ze spiekania folii Cu pokrytych grafenem?
- czy możliwe jest uwzględnienie w modelu cyfrowej mikrostruktury miedzi orientacji krystalograficznych ziaren i jak to może wpłynąć na zagadnienia przepływu ciepła?
- czy uwzględnienie w modelu krzywizny granic ziaren, która będzie rzutować na kształt warstw grafenu jest istotne z punktu widzenia przeprowadzonej dyskusji?
- co Autor rozumie pod stwierdzeniem ze strony 77, odnośnie „dopracowania i automatyzacji” opracowanego sposobu dopasowania modelu?
- czy istnieją techniczne ograniczenia dla których w pracy nie zrealizowano przykładowych obliczeń z uwzględnieniem porowatości (strona 79)?

5. Podsumowanie

Autor na bazie zaproponowanych założeń właściwie przeprowadził prace w swoim doktoracie wykazując się wymaganą dojrzałością naukową. Zaprezentował umiejętności i wiedzę niezbędną do samodzielnego sformułowania oraz rozwiązania zagadnienia naukowego. Warto podkreślić, iż uzyskane wyniki mają bardzo praktyczny wymiar i umożliwią w przyszłość efektywniejsze projektowanie wyrobów z omawianych materiałów kompozytowych.

Przedstawione powyżej uwagi krytyczne są w dużej mierze dyskusyjne i wynikają z zainteresowania recenzenta przedstawioną pracą. Nie obniżają one jednak pozytywnej oceny przedstawionej rozprawy doktorskiej, która jest wartościową pozycją naukową. Uważam, że opiniowana rozprawa doktorska, spełnia warunki określone obowiązującą ustawą o Stopniach Naukowych i Tytule Naukowym z 16 kwietnia 2003 r. z późn. zm. Wnioskuje o dopuszczenie mgr inż. Mateusza Grybczuka do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Zdzisław Madej