

Oponentské vyjádření k doktorské disertační práci

Teoretické a experimentální studium teplot fázových transformací ocelí

(VŠB- TU Ostrava, Fakulta metalurgie a materiálového inženýrství, katedra fyzikální chemie a teorie technologických pochodů, 2018)

Studijní obor: Chemická metalurgie
Doktorand: Ing. Ondřej **MARTINÍK**
Školitel: doc. Ing. **Bedřich Smetana**, Ph.D.
Školitel specialista: Ing. **Monika Kawuloková**, Ph.D.
Rozsah práce: 106 stran textu, 152 příloh, 164 citací literatury

Posuzovaná doktorská disertace Ing. O. Martiníka je experimentálně-analytického charakteru a věnuje se teplotám (základních) fázových přeměn ocelí – teplotě „solidu“ (T_s), „liquidu“ (T_L) a teplotě peritektické přeměny (T_p). Cíl práce je konkretizován na str. 3 pro tři postupové kroky: a) získání experimentálních teplot fázových přeměn metodami termické analýzy; b) výpočet teplot fázových přeměn s využitím empirických vztahů a „termodynamického“ software; c) vytvoření nového modelu pro výpočetní odhad teplot fázových přeměn. Takto formulovaný cíl autor v práci přesvědčivě dosáhl, přičemž za hlavní přínos práce pokládám konfrontaci vlastních experimentálních údajů (získaných pomocí vysoce moderní přístrojové techniky) s výsledky výpočetních simulací pomocí empirických vztahů či komerčních SW (Thermo-Calc (TC) a InterDendritic Solidification (IDS)). Za přínosné pokládám i rešeršní shrnutí a analýzu snad všech existujících – celkem 46-ti - empirických rovnic pro vyčíslení teplot studovaných fázových přeměn.

Práce je standardně členěna na teoretickou a experimentální část. Do textu je zahrnuta řada číselných výsledků z experimentů a statistického zpracování pořízených dat, což text činí poněkud náročnějším pro souvislé čtení. V posuzované práci jsem také zaregistroval spornější tvrzení či neuvážené formulace, kterým se dalo předejít důslednější editací závěrečného textu. Ze svých připomínek, které k práci mám, vybírám následující:

- S ohledem na to, že jednou ze tří stěžejních sledovaných veličin je teplota peritektické přeměny T_p , nepokládám za vhodné, že stejný symbol pro její označení je v práci použit i pro „teplotu maxima píku“ (viz str. 89). Dovoluji si současně poukázat, že termín „teplota maxima píku“ zde není použit zcela korektně, když (např.) z obrázků 2, 3 na str. 12 je zřejmé, že T_p se týká (i) teplot minima píků.
- Str. 5, 2. odst.: Zaujalo mne formulace, že „hledáme ... takové složení fází, pro které nabývají chemické potenciály hodnoty nula, tj. jsou v termodynamické rovnováze“. Takovouto podmínku termodynamické rovnováhy nepokládám zrovna za obvyklou, uvítám proto její osvětlení v širším (fyzikálně-chemickém) kontextu.
- Str. 6, Obr. 1: Pro vysvětlení teploty peritektické přeměny – jako základní sledované veličiny - pokládám uvedený formát obr. 1 za nepřehledný, a to i za použití „silně zvětšujícího skla“.
- Str. 7, 3. odst. odspodu: Musím přiznat, že nerozumím zcela popsanému odlišení mezi peritektickou transformací a peritektickou reakcí, tj.: „Při peritektické reakci jsou všechny tři fáze, ferit δ , austenit γ a tavenina L , ve vzájemném kontaktu. Při peritektické transformaci jsou tavenina a ferit δ odděleny fází austenitu γ “. Je prosím možné vysvětlit tento rozdíl názorněji?
- Str. 21, rovnice (37) + str. 23, rovnice (57): Zaujalo mne, že v obou rovnicích je na pravé straně uvedeno několik (přesněji 7, resp. 6) absolutních členů, které se daly/měly(?) shrnout do jediného.

- Str. 25, poslední odst.: Formulace „... metodami, založenými např. na kritickém poměru mezi elektronem nebo na elektronové hustotě, umožňuje ...“ není (pro mne) srozumitelná.
- Str. 25, 1. odst.: Osobně si dovedu sotva představit, jakými následnými úpravami se podaří diferenciací rovnice (59) získat vztah (61) pro tepelnou kapacitu. Je možné takovéto odvození demonstrovat?
- Str. 35: V souvislosti s prezentací chemického složení analyzovaných ocelí v tab. 5 si neodpustím poznámku: Celá doktorská práce je charakterizována autorovým, bezezbytku chvályhodným úsilím zhodnotit a kvantifikovat spolehlivost/přesnost získaných údajů o teplotách (daných) fázových přeměn. Obsahy jednotlivých chemických prvků ve sledovaných vzorcích oceli jsou ale v tab. 5 uvedeny s „absolutní přesností“ (až na 4 platné číslice pro Mn) – bez reflexe skutečnosti, že i toto jsou výsledky experimentálních zkoušek zatížených nepřesností/chybou, která zde měla být vhodným způsobem respektována či alespoň zmíněna v textu.
- Str. 40, 4. odst.: Pokládám za (minimálně) zavádějící, když jako termodynamicky stabilní fáze uhlíku je vedle grafitu a diamantu současně uveden i cementit.
- Str. 89: Rozměr/jednotka standardní molární entropie (jistě) není „J mol⁻¹“.
- Str. 91: V případě slov „Baseline“, „Blank“ a „Peak“ se nejedná o zkratky.

Na doktoranda mám pak dva dotazy (jeden spíše teoretický, druhý experimentálně-praktický), na které bych uvítal reakci při vlastní obhajobě:

- 1) Ze základní představy o peritektické přeměně bych očekával, že její teplota T_p se bude „normálně“ pohybovat v rozmezí teplot od T_S (včetně) do hodnoty T_L . Pokládám proto za pozoruhodné, že autor dospěl i k hodnotě T_p , která je vyšší nežli teplota likvidu (str. 65, obr. 32). Na obrázku 29, strana 62, je pak demonstrován „opačný“ případ, kdy průběh teplot peritektické přeměny „podkračuje“ hodnoty teplot solidu. V práci takováto zjištění diskutována nejsou. Je možné tyto případy okomentovat „alespoň“ v průběhu obhajoby? Jak budou vypadat fázové diagramy takovýchto rovnováh?
- 2) V popisu postupu vyhodnocení DTA křivek (na str. 44) je zdůrazněn význam zkušenosti a erudice dotyčného pracovníka při konstrukci přímek pro stanovení teplot T_S , T_p ; v některých případech je totiž průběh DTA křivek jen povlovně monotónní a věrohodné proložení tečen tak může být značně problematické (např. příloha. 70 – 72, str. 135). V té souvislosti mne zaujal průběh trojího opakování zkoušky DTA pro vzorek oceli č. 1 (příloha 1-3, str. 112), kdy při teplotách okolo 1460-1465°C vykazují křivky DTA sice nevýrazný, ale reprodukovatelný inflexní bod, který při vyhodnocování zkoušek zohledněn nebyl. Co prosím rozhodlo o vyřazení tohoto efektu na DTA křivce při jejím vyhodnocování?

Na základě prostudování práce konstatuji, že přes výše upřesněné připomínky práci doporučuji přijmout k obhajobě.

Ostrava 9. října 2018

Boleslav Taraba (Prof., Ing., CSc.)
katedra chemie PřF, Ostravská univerzita
30.dubna 22, Ostrava 1, 701 03