

## OCENA

osiągnięcia naukowego

„Modelowanie materiałów magnetycznych z wykorzystaniem teorii funkcjonału gęstości”  
oraz aktywności naukowej dr. inż. Mirosława Werwińskiego  
w ramach przewodu habilitacyjnego

## Informacje ogólne

Pan dr inż. Mirosław Werwiński jest absolwentem Wydziału Fizyki Technicznej Politechniki Poznańskiej. Tytuł magistra inżyniera uzyskał w 2006 r. za pracę: „Badanie własności elektronowych i magnetycznych związków uranu:  $\text{UCoAs}_2$ ,  $\text{UCo}_4\text{B}$  i  $\text{U}_5\text{Ge}_4$  w oparciu o obliczenia *ab initio* struktury elektronowej” przygotowaną pod kierunkiem dr. hab. Andrzej Szajka (Instytut Fizyki Molekularnej PAN). Rozprawę doktorską pt. „Obliczenia z pierwszych zasad własności elektronowych i magnetycznych wybranych związków międzymetalicznych zawierających cer, samar i uran” kandydat obronił w roku 2011 w Instytucie Fizyki Molekularnej PAN. Promotorem w przewodzie doktorskim był dr hab. Andrzej Szajek, natomiast rolę recenzentów pełnili: dr hab. Tomasz Kostyrko oraz prof. dr hab. Stanisław Kaprzyk.

Od lutego 2012 roku dr inż. Mirosław Werwiński jest zatrudniony na stanowisku adiunkta w zakładzie Fizyki Teorii Ciała Stałego w IFM PAN. Od listopada 2012 r. do kwietnia 2015 r. dr inż. Mirosław Werwiński odbył staż podoktorski na Wydziale Fizyki i Astronomii Uniwersytetu w Uppsali (Szwecja) w grupie profesora Olle Erikssona.

Do momentu złożenia wniosku habilitant opublikował 42 artykuły naukowe w czasopismach, znajdujących się w bazie JCR (Journal Citation Report). Liczba artykułów opublikowanych po uzyskaniu stopnia doktora wynosi 30, z czego 8 publikacji stanowi osiągnięcie naukowe przedłożone jako podstawa wniosku o nadanie stopnia doktora habilitowanego. Cechą charakterystyczną tego dorobku jest to, iż wszystkie dotychczas opublikowane artykuły naukowe są współautorskie. Dokumentacja, (w skład której między innymi wchodzi dyplom doktora, autoreferat w języku polskim i angielskim, wykaz osiągnięć, oświadczenia współautorów, kopie artykułów), zawiera ocenę opisową i procentową wkładu własnego habilitanta w całość dorobku, jak i wymagane oświadczenia współautorów wszystkich wspólnych prac, wchodzących w skład cyklu habilitacyjnego.

## Osiągnięcie naukowe

Przedstawionym do recenzji osiągnięciem naukowym, stanowiącym podstawę wniosku habilitacyjnego dr. inż. Mirosława Werwińskiego, jest zbiór 8 artykułów naukowych opublikowany w latach 2014-2019, opatrzonych wspólnym tytułem: „Modelowanie materiałów magnetycznych z wykorzystaniem teorii funkcjonału gęstości”. Cykl wskazanych prac obejmuje publikacje współautorskie z dominującym udziałem kandydata – dr inż. M. Werwiński jest pierwszym autorem przedstawionych publikacji i wkład własny ocenia jako mieszczący się w przedziale od 50% do 90%. Załącznik 5 do dokumentacji zawiera wymagane ustawowo szczegółowe oświadczenia wszystkich współautorów prac. W autoreferacie zostało podkreślone, że połowa publikacji ze wskazanego cyklu ma charakter teoretyczny i obliczeniowy, natomiast druga połowa powstała we współpracy z grupami

eksperymentalnymi. Publikacje wchodzące w skład osiągnięcia habilitacyjnego ukazały się w następujących czasopismach z listy Journal Citation Reports (JCR): Physical Review B (3 prace); Journal of Alloys and Compounds (2 prace); Computational Materials Science (2 prace); Journal of Physics D: Applied Physics (1 praca). Omówienie cyklu tych publikacji stanowi zasadniczą część autoreferatu (34 strony) kandydata.

We wstępnej części swojego autoreferatu dr inż. M. Werwiński przedstawia cele naukowe i wyjaśnia powody wyboru trzech różnorodnych grup materiałów, którym poświęcone są poszczególne prace [H1-H8]. Habilitant wytycza cztery następujące cele:

1) wyjaśnienie obserwowanych doświadczalnie właściwości fizycznych (strukturalnych, elektronowych i magnetycznych) wybranych materiałów na podstawie wyników obliczeń struktury elektronowej;

2) wyjaśnienie wpływu domieszek Mg, Co i Gd na właściwości elektrochemiczne stopów na bazie  $\text{La}_2\text{Ni}_7$  – (materiały na elektrody akumulatorów niklowo-metalowo-wodorkowych);

3) określenie wymaganych poziomów przybliżeń stosowanych do opisu  $f$  elektronów w modelach DFT związków uranu ( $\text{UNi}_x\text{Sb}_2$ ,  $\text{UCuSb}_2$ ,  $\text{URu}_2\text{Si}_2$ ), pozwalających na przewidywanie ich właściwości magnetycznych;

4) określenie możliwości zastosowania związków  $\text{Fe}_5\text{SiB}_2$ ,  $\text{Fe}_5\text{PB}_2$ ,  $\text{L1}_0$  FeNi oraz ich stopów jako magnesów trwałych niezawierających pierwiastków ziem rzadkich.

Cel wymieniony jako pierwszy można odnieść do kluczowych zagadnień przyświecających większości badań pojawiających się w literaturze, w których stosowane są metody Teorii Funkcjonału Gęstości (DFT - *density functional theory*). Cele 2) i 4), jak to wynika z opisu *przedmiotu badań*, ważne są nie tylko ze względów poznawczych, ale przede wszystkim ze względów aplikacyjnych. W tym przypadku, jak przedstawia habilitant, mogą wytyczać bardzo konkretne kierunki badań inżynierii materiałowej dla dwóch istotnych obecnie grup materiałów: związków znajdujących zastosowanie w akumulatorach oraz stopów służących jako magnesy trwałe pozbawione pierwiastków ziem rzadkich. Dla związków z następnej grupy, tzn.  $\text{UNi}_x\text{Sb}_2$ ,  $\text{UCuSb}_2$ , oraz  $\text{URu}_2\text{Si}_2$ , cel 3) mieści się również w ogólnym nurcie badań, wykorzystujących metodologię DFT i jest w dużej mierze związany z odpowiedzią na pytania: czy metody DFT są w stanie poprawnie opisać układy, w skład których wchodzi atomy z powłoką  $f$ -elektronową? Czy i jakie przybliżenia potencjałów wymiennie-korelacyjnych będą odzwierciedlać skomplikowaną naturę zjawisk zachodzących w tych układach z udziałem elektronów z powłoki  $f$ ? Czy wyjście w obliczeniach struktury elektronowej ciała stałego poza *ab initio* („pierwsze zasady”) i zastosowanie, na przykład, poprawki U (LDA+U, GGA+U), za pomocą której próbujemy opisać odpychanie kulombowskie na poszczególnych powłokach, poprawi opis stanu podstawowe rozpatrywanego układu? Z punktu widzenia tych ważnych, a w wielu przypadkach nadal nierozstrzygniętych kwestii, cel postawiony przy badaniu układów z uranem ([H3-H5]) można zaliczyć do podstawowych z punktu widzenia struktury elektronowej ciał stałych.

W części wstępnej autoreferatu, opisie *przedmiotu badań* autorowi niestety nie udało się uniknąć kilku potocznych sformułowań, uproszczeń slangowych, jak również kilku drobnych pomyłek. Zważając jednak na fakt, iż ocenie podlega wartość naukowa wyników zawartych w przedstawianych publikacjach pominę ocenę samego autoreferatu.

Przechodząc zatem do głównych rezultatów przedstawionych przez dr. M. Werwińskiego jako osiągnięcie, należy zauważyć, iż w pracy [H1] obliczenia *ab initio* posłużyły do oceny stabilności faz typu  $\text{Ce}_2\text{Ni}_5$  oraz  $\text{Gd}_2\text{Ni}_5$ , obecność których niejednokrotnie wykazano w badanych eksperymentalnie próbkach zarówno  $\text{La}_2\text{Ni}_7$  jak i  $\text{La}_{1.5}\text{Mg}_{0.5}\text{Ni}_7$ . Z obliczeń przeprowadzonych przez habilitanta zostało ustalone, że dla układów w podstawieniu Mg w miejsce La preferowane są pozycje:  $4f_i$  dla fazy  $\text{La}_{1.5}\text{Mg}_{0.5}\text{Ni}_7$  typu  $\text{Ce}_2\text{Ni}_7$  oraz  $6c_2$  dla fazy  $\text{La}_{1.5}\text{Mg}_{0.5}\text{Ni}_7$  typu  $\text{Gd}_2\text{Co}_7$ . Porównanie wyników obliczeń z eksperymentalnym widmem XPS pozwoliły autorom pracy [H1] poczynić wniosek o obecności



dotodkowej fazy tlenku lantanu  $\text{La}_2\text{O}_3$ . Ciekawym wynikiem, który został uzyskany za pomocą obliczeń DFT, lecz nie został skomentowany, jest osobiwość van Hove'a w pobliżu poziomu Fermiego w gęstości stanów elektronowych dla badanych w tej pracy układów:  $\text{La}_2\text{Ni}_7$  jak i  $\text{La}_{1.5}\text{Mg}_{0.5}\text{Ni}_7$ . Do tego wyniku autorzy odwołują się w pracy [H2], przeprowadzając szczegółową analizę wpływu domieszek na gęstość stanów elektronowych (DOS) w pobliżu poziomu Fermiego. Osobiwość van Hove'a w pobliżu poziomu Fermiego należy wiązać z duży prawdopodobieństwem przejścia ze stanów lub do stanów w pobliżu wysokiego pik w DOS, zatem można oczekiwać wysokiej intensywności w widmie absorpcyjnym lub emisyjnym takiego układu. Autorzy w pracy [H2] ze względu na ograniczenia techniczne (tzn. niską rozdzielczość sprzętu XPS) nie byli w stanie eksperymentalnie przeprowadzić dokładnej obserwacji tak wąskiego pik. Z tego powodu dyskusja wyników otrzymanych z obliczeń dla  $\text{La}_{1.5}\text{Mg}_{0.5}\text{Ni}_{6.5}\text{Co}_{0.5}$ , a zwłaszcza osobiwości van Hove'a, jest bardzo interesująca. Z jednej strony autorzy podkreślają ograniczenia opisu układu w ramach stosowanych przybliżeń DFT (takich jak VCA – *virtual crystal approximation*, czy CPA – *coherent potential approximation*), z drugiej starają się nawiązać do danych otrzymanych w pomiarach elektrochemicznych odpowiedniej próbki. Obecność osobiwości van Hove'a w pobliżu poziomu Fermiego w gęstości stanów elektronowych badanego układu jest sugerowana jako jedna z przyczyn obserwowanych zmian własności elektrochemicznych układu.

Wybór przez habilitanta do badań następnej grupy układów, do której należą  $\text{UNi}_x\text{Sb}_2$ ,  $\text{UCuSb}_2$ , oraz  $\text{URu}_2\text{Si}_2$  ([H3]-[H5]), świadczy o tym, że po doktoracie związki z uranem niezmiennie pozostają w kręgu zainteresowań dr. M. Werwińskiego. W pracy [H3] analizowano w jaki sposób zmniejszenie zawartości Ni wpłynie na właściwości magnetyczne  $\text{UNi}_x\text{Sb}_2$ . Przyjęty w obliczeniach model superkomórki odpowiada – z punktu widzenia krystalograficznego – tetragonalnej strukturze typu  $\text{HfCuSi}_2$  (P4/nmm). Struktura ta dla układu  $\text{UNi}_{0.5}\text{Sb}_2$  wcześniej została opisana w pracy Z. Bukowski et al., *Intermetallics* 12 (2004) 1381. Procedura stosowana przez habilitanta związana jest z zastosowaniem odpowiedniej macierzy transformacji<sup>1</sup> do komórki elementarnej, następnie zaś pominięciem w zadanej liczbie pozycji krystalograficznych wybranego atomu. Taką superkomórkę poddaje się „optymalizacji struktury” na poziomie kodu obliczeniowego (często można również spotkać alternatywne nazewnictwo: „relaksacja położeń i stałych sieci”). Jest to typowa i powszechnie stosowana w literaturze procedura w obliczeniach DFT dla układów złożonych<sup>2</sup>, tym niemniej definiowanych w przestrzeni rzeczywistej przez okresowe warunki brzegowe. Dla układu  $\text{UNi}_x\text{Sb}_2$  ( $0 \leq x \leq 1$ ), w którym autorzy zakładają z góry zachowanie symetrii przestrzennej typu P4/nmm, habilitant w obliczeniach bierze pod uwagę kilka możliwych antyferromagnetycznych aranżacji momentu magnetycznego na atomach uranu w superkomórce, uwzględniając jednocześnie fakt, że momenty magnetyczne są sprzężone ferromagnetycznie w płaszczyznach *ab*. Przy wyżej wspomnianych założeniach najniższą energię całkowitą w  $\text{UNi}_x\text{Sb}_2$  otrzymano w pracy [H3] dla uporządkowania oznaczonego jako „+ - + -”. W pracy [H3] można znaleźć również obszerną informację, dotyczącą obliczonych (w ramach PBE i PBE+OP) wartości całkowitych, spinowych i orbitalnych momentów magnetycznych na uranie dla modelu układu  $\text{UNi}_x\text{Sb}_2$  ( $x=0, 0.33, 0.5, 0.66, 1$ ) (P4/nmm).

Bardzo szkoda, że w obliczeniach przedstawionych w pracy [H3] nie był również rozważany model superkomórki, odpowiadający strukturze tetragonalnej reprezentowanej przez grupę przestrzenną

---

<sup>1</sup> Macierz transformacji, która jest stosowana w tym przypadku to: 
$$P = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

<sup>2</sup>Układami, które w literaturze opisywane za pomocą superkomórek są między innymi różnorodne związki z podstawieniami atomów jednych pierwiastków przez inne, z defektami obsadzeń, lukami tlenowymi, układy domieszkowane itp.

$P4_2/nmc$ , w której atomy Ni są w dwóch nierównoważnych krystalograficznie położeniach (2a) i (2b). Występowanie struktury tego typu wykazano dla monokryształu  $UNi_{0.5}Sb_2$  w 2011 r. (Torikachvili et al., Phys. Rev. B 84 (2011) 205114). Dodatkowo we wspomnianej pracy z 2011 r. zostało pokazane, że odbicia magnetyczne odpowiadają ferromagnetycznie ustawionym momentom magnetycznym na atomach uranu w płaszczyznach  $ab$  z jednoczesnym antyferromagnetycznym ustawieniem tych płaszczyzn wzdłuż tetragonalnej osi  $c$  zgodnie ze schematem „+ - + -”.

W pracy [H3] zauważyłam, że otrzymana w obliczeniach stała sieci  $c$  dla  $x = 0.5$  porównywana jest na rysunku 3 z eksperymentalnym wynikiem dla  $UNi_{0.5}Sb_2$  z wyżej wspomnianej pracy (PRB 2011). Do takiego porównania i wnioskowania z niego wynikającego ustosunkowuje się krytycznie, ponieważ wynik eksperymentalny odnosi się do monokryształu  $UNi_{0.5}Sb_2$  ( $P4_2/nmc$ ), w którym atomy Ni nie są ulokowane planarnie (czy też *warstwowo*).

W pracy [H4], która związana jest z badaniem stanu podstawowego ferromagnetycznego  $UCuSb_2$ , zostały przedstawione wyniki obliczeń struktury elektronowej przeprowadzone za pomocą kilku kodów obliczeniowych z pełnym potencjałem (FP-LAPW, FPLO oraz FP-LMTO). W pewnym sensie związek  $UCuSb_2$  posłużył jako układ, dla którego przetestowano trzy różne bazy funkcji falowych oraz różnorodne podejścia do opisu efektów korelacyjnych w ramach DFT (tzn. energia wymiennie-korelacyjna stosowana była z uwzględnieniem gradientowych poprawek w formie zaproponowanej w 1996 roku przez Perdew-Burke-Ernzerhafa oraz nielokalnych poprawek zasugerowanych przez Vosko, Wilka i Nusaira w roku 1980 na podstawie interpolacji Padé). Ze względu na obecność elektronów  $5f$  atomów uranu, dla których korelacje wielocząstkowe mogą odgrywać istotną rolę, habilitant przeprowadził również obliczenia uwzględniające wewnątrzatomowe odpychanie kulombowskie poprzez dodanie do energii wymiennie-korelacyjnej parametru  $U$  (GGA+ $U$ ). Celem uzyskania zgodności z eksperymentalnymi wynikami otrzymanymi wcześniej dla badanego związku w Instytucie Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN, w obliczeniach w [H4] została dodatkowo wprowadzona poprawka  $U$  dla powłoki elektronowej  $3d$  Cu. W pracy [H4] dyskutowany był wpływ wartości parametru  $U$  na gęstość stanów elektronowych w zakresie energii ( $-6$  eV,  $-3$  eV) i w pobliżu poziomu Fermiego. Porównane również zostały wartości momentów magnetycznych obliczone przy zastosowaniu różnych metod obliczeniowych DFT. Habilitant omawiając wyniki pracy [H4] zwraca uwagę, że zastosowanie w obliczeniach potencjału, uwzględniającego wpływ orbitalnej polaryzacji (tzn. GGA+OP) „pozwała osiągnąć wartość momentu możliwie najbliższą eksperymentalnej, nie wymagając zarazem dodatkowych parametrów, jak metoda GGA+ $U$ .” Na marginesie należy jednak dodać, że prawdopodobnie przypadkowo habilitant w autoreferacie pomija fakt, że również wynik dla całkowitego momentu magnetycznego otrzymany za pomocą LmtART ( $1.10 \mu_B$  - Tabela 2 w pracy [H4]) jest również zbliżony do wartości eksperymentalnej ( $1.30 \mu_B$ ) [PRB 58 (1998) 9227]. Podjęta w publikacji [H4] dyskusja wyników otrzymanych z obliczeń GGA, GGA+ $U$  oraz GGA+OP, między innymi: wartości momentów magnetycznych (w tym składowe spinowe i orbitalne), roli pasma  $3d$  metalu przejściowego, powierzchni Fermiego dla związku  $UCuSb_2$ , dają podstawę do stwierdzenia, że cel 3) postawiony przez habilitanta w przypadku tej pracy został osiągnięty.

Podczas swojego stażu na Wydziale Fizyki i Astronomii Uniwersytetu w Uppsali (Szwecja) dr Mirosław Werwiński włączył się w bardzo interesujące badania nad układem  $URu_2Si_2$ . Współpraca w zespole: Jan Rusz (Uppsala), Peter M. Oppeneer (Uppsala) oraz John A. Mydosh (Leiden) zaowocowała publikacją [H5], w której poruszane są kwestie dotyczące przejścia drugiego rodzaju w  $URu_2Si_2$  w temperaturze  $T=17.5$  K. Przejście to, jak wynika z literatury, nie jest związane z magnetyzmem dalekiego zasięgu, brak jest zmiany modulacji sieci związanej, czy to z powstawaniem fal gęstości spinowej, czy też ładunkowej. Brak charakterystycznych wzbudzeń elementarnych dla



powstającej fazy, jak i zdefiniowanego parametru porządku spowodowało, że interpretacja otrzymywanych w literaturze wyników eksperymentalnych często nie oddawała natury uporządkowania układu.

Wyniki obliczeń przedstawione w pracy [H5] według autorów, jak również habilitanta, stanowią dowód przemawiający za tym, iż w układzie  $URu_2Si_2$ , traktując elektrony z powłoki  $5f$  uranu jako elektrony pasmowe (założenie delokalizacji) oraz uwzględniając sprzężenie spin-orbita w sposób samozgodny, otrzymuje się obraz jednoosiowej anizotropii typu Isinga. Takie zachowanie jest związane z dużym rozszczepieniem spin-orbita ( $0.8$  eV) stanów  $5f$  elektronowych w porównaniu z oddziaływaniem wymiany ( $0.1$  eV).

Seria prac [H6]-[H8] dedykowana jest materiałom, które są obiecujące jako materiały na magnesy trwałe. W pracach tych poruszane są zagadnienia związane z wyznaczaniem energii anizotropii magnetokrystalicznej w kilku związkach żelaza. W pracy [H6] habilitant badał  $L1_0FeNi$  (tetrataenit), stosując konsekwentnie przybliżenie GGA dla potencjału wymiennie-korelacyjnego w ramach trzech kodów obliczeniowych DFT z pełnym potencjałem i funkcjami falowymi z bazami określonymi: poprzez lokalne orbitale atomowe, dołączone fale płaskie oraz funkcje Greena (FPLO, FP-LAPW, FP-SPR-KKR). Z bardzo dużą starannością i dokładnością wykonane przez habilitanta obliczenia oraz zestawienie otrzymanych wyników z danymi z literaturowymi dla  $FeNi$  dają dość wyczerpującą informację, dotyczącą rzędów wielkości wartości takich ważnych parametrów materiałowych jak: stałe anizotropii magnetokrystalicznej ( $K_1$ ,  $K_2$ ,  $K_3$ ), współczynnik magnetostrykcji  $\lambda_{001}$ , moduł ściśliwości objętościowej  $B_0$  oraz momentów magnetycznych. W pracy pokazane zostały zależności energii anizotropii magnetokrystalicznej (MAE) od wektora falowego  $\mathbf{k}$  w  $1/8$  części strefy Brillouina, jak również zaprezentowana została obliczona powierzchnia Fermiego.

Przedmiotem badań następnych dwóch publikacji [H7] oraz [H8] (jak również prac z poza cyklu habilitacyjnego [P13] i [P14]) są stopy  $Fe_5XB_2$  ( $X=Si, P, S$ ) oraz ich modyfikacje dotyczące częściowych podstawień atomów  $Fe$  i  $X$ . Prace te są przykładem bardzo szczegółowo i systematycznie realizowanej strategii poszukiwania optymalnych składów stopów na magnesy trwałe i w tym przypadku jest oczywiste, że badania tego rodzaju wymagają zaangażowania licznej grupy osób, które zajmują się nie tylko obliczeniami struktury elektronowej, szacowaniem parametrów materiałowych wynikających z przesłanek teoretycznych, ale również grupy eksperymentalnej, która skoncentruje się na weryfikacji prognoz teoretycznych. Przebywając na stażu podoktorskim na Uniwersytecie w Uppsali (Szwecja) dr inż. Mirosław Werwiński bardzo aktywnie włączył się w badania poświęcone tej tematyce. W autoreferacie habilitant dokładnie sprecyzował swoją rolę w tych pracach. Za najważniejsze osiągnięcie dr inż. M. Werwiński podał: „opracowanie metody pozwalającej na określenie optymalnych składów stopów do zastosowań jako magnesy trwałe na podstawie dwuwymiarowej mapy  $MAE(x, m)^{33}$ . Z aplikacyjnego punktu widzenia, jest to bardzo ważne, ponieważ pozwala ustalić optymalny skład stopu, który będzie posiadać odpowiednio wysoką energię anizotropii magnetokrystalicznej. Taka prognoza została poczyniona przez habilitanta w pracy [H7], mianowicie najbardziej obiecujący skład to  $(Fe_{0.7}Co_{0.3})_5SiB_2$  z domieszką  $Mo$ ,  $W$  lub  $Re$ . Wnioski wynikające z teoretycznych badań anizotropii magnetokrystalicznej stopu  $Fe_5PB_2$  oraz stopów modyfikowanych  $Co$  i pierwiastkami  $5d$  (w pracy [H8]) są również bardzo pożyteczne, z uwagi na fakt, że dość dokładnie wskazują czynniki, które będą sprzyjać wzrostowi wartości energii anizotropii magnetokrystalicznej, określają spodziewaną wartość temperatury Curie i namagnesowania nasycenia.

---

<sup>33</sup> $MAE(x, m)$  jest w tym przypadku funkcją dwóch zmiennych: koncentracji jednego ze składników –  $x$ , oraz całkowitego momentu magnetycznego –  $m$ .

Jedno z kryteriów oceny w zakresie osiągnięć naukowo-badawczych habilitanta, zgodnie z obowiązującym rozporządzeniem Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego, obejmuje liczbę cytowań publikacji według bazy Web of Science (WoS). Dla ośmiu publikacji [H1-H8] w bazie WoS (początek lutego 2020 r.) sumaryczna liczba cytowań wynosi 46, natomiast bez autocytowań jest to liczba 20. Z pobieżnej analizy wynika, że prace [H1], [H2], [H5], [H6], [H7] zostały również zauważone poza grupami, z którymi współpracował dr inż. Mirosław Werwiński.

W podsumowaniu tej części należy zaznaczyć, że osiągnięcie naukowe – cykl ośmiu publikacji naukowych - w części stanowiącej wkład dr. inż. Mirosława Werwińskiego, jest ważnym przyczynkiem w poszerzeniu wiedzy na temat stanu podstawowego, właściwości magnetycznych kilku materiałów wśród których znajdują się:  $\text{UNi}_x\text{Sb}_2$ ,  $\text{UCuSb}_2$ ,  $\text{URu}_2\text{Si}_2$ , materiały na elektrody akumulatorów niklowo-metalowo-wodorkowe stanowiące modyfikację stopu  $\text{La}_2\text{Ni}_7$ , materiały rozpatrywane pod kątem zastosowań jako magnesy trwałe  $\text{Fe}_5\text{SiB}_2$ ,  $\text{Fe}_5\text{PB}_2$  oraz  $\text{L}_{10}\text{FeNi}$ . Postawione przez habilitanta cele badawcze zostały zrealizowane oraz udokumentowane w pracach opublikowanych w czasopiśmie, które znajdują się w międzynarodowej bazie JCR. Za oryginalny wkład habilitanta należy uznać schemat analizy dwuwymiarowej mapy energii magnetokrystalicznej. Analiza składów stopów na podstawie dwuwymiarowej mapy energii magnetokrystalicznej, wprowadzona w zakresie badań właściwości magnetycznych za pomocą metod DFT przez habilitanta, wypełnia pewną lukę wśród wcześniej dostępnych metod, za pomocą których określany jest optymalny skład stopów.

### **Ocena istotnej aktywności naukowej habilitanta**

Na całkowity dorobek naukowy dr. inż. Mirosława Werwińskiego w dniu 25.04.2019 (moment wnioskowania do Centralnej Komisji do Spraw Stopni i Tytułów) składały się 42 publikacje w czasopiśmie objętych bazą JCR (Journal Citation Report). Zarówno prace wskazane jako osiągnięcie habilitacyjne, jak i prace [P1]-[P34]<sup>4</sup> również zostały opublikowane w renomowanych czasopiśmie naukowych takich jak: Journal of Alloys and Compounds (5), Physical Review B (6), Journal Physics D: Appl. Physics (1), Inorganic Chemistry (1), Scientific Reports (1), Surf. Coat Technol. (1) Comp. Mat. Science (1), Journal Applied Physics (2), Journal of Physics: Condensed Matter (3), Intermetallics (1), Mat. Sci Poland (2), Acta Physica Polonica A (10). Tak szeroki wachlarz tytułów czasopiśm przełożył się na sumaryczną wartość współczynnika Impact Factor równą 98.39. Wartość tego współczynnika została określona według wyżej wspomnianej bazy JCR zgodnie z rokiem opublikowania prac. Liczba cytowań prac opublikowanych przez habilitanta według bazy Web of Science wynosiła 212. Wartość indeksu Hirscha według bazy WoS wynosi 9.

Do najczęściej cytowanych pozycji habilitanta należą prace opublikowane w latach 2014-2016: [P19], [P16], [P18], cytowane odpowiednio 42, 33 i 19 razy w bazie WoS na początku lutego 2020 r. Prace [16], [P18], [P19] dedykowane są stopom Fe-Co-B, w których badano możliwość jednoosiowego odkształcenia na skutek domieszkowania atomami B i C, lokującymi się w oktaedrycznych lukach międzywęzłowych. Wśród prac habilitanta związanych z obliczeniami struktury elektronowej i określeniem uporządkowania magnetycznego związków cerowych i uranowych w literaturze najczęściej zauważalne są pozycje [P28-P29] oraz [P5-P6]. Te prace opublikowane były jeszcze przed uzyskaniem stopnia doktora i powstały we współpracy z zespołami eksperymentalnymi z INTiBS PAN (Wrocław) oraz Uniwersytetu Śląskiego. Współpraca z grupą eksperymentalną z Zakładu Stopów Magnetycznych z IFM PAN (Poznań) dotyczyła zagadnień uporządkowania magnetycznego i nieporządku strukturalnego fazy Lavesa ( $\text{C}_{15}$ , struktura typu  $\text{MgCu}_2$ ) w czystym  $\text{YCo}_2$  oraz

---

<sup>4</sup>Pozycje prac od [P1] do [P34] są zgodne z listą publikacji podaną przez habilitanta w Autoreferacie na stronach 38-45.



modyfikowanym poprzez podstawianie itru atomami gadolinu. Prace dotyczące tych zagadnień, tj. [P22] i [P23] zostały opublikowane w 2014 i 2017 roku, cytowane są odpowiednio 13 i 12 razy.

Dokumentacja dotycząca części aktywności naukowej dr. inż. M. Werwińskiego zawiera tytuły referatów wygłoszonych podczas międzynarodowych i krajowych konferencji tematycznych, i świadczy o tym, że tematy tych referatów są ściśle związane z prowadzonymi przez kandydata badaniami. Habilitant również aktywnie prezentuje wyniki swoich badań w krajowych lub zagranicznych ośrodkach naukowych. Prezentacja plakatu, której jednym ze współautorów był habilitant, zaprezentowana na konferencji INTERMAG w 2014 w Dreźnie została wyróżniona jako najlepszy poster.

Po uzyskaniu stopnia doktora habilitant brał udział jako wykonawca w 4 projektach badawczych, przy czym jeden z projektów dotyczył 7 Ramowego Programu Unii Europejskiej. W roli kierownika habilitant występuje w projekcie o charakterze międzynarodowym „Influence of chemical disorder on the properties of selected rare-earth free permanent magnets” finansowanym przez Fundację na rzecz Nauki Polskiej (01.01.2017-30.04.2019 - program HOMING) oraz w projekcie „Nanostruktury warstwowe do zastosowań w spintronice oraz jako magnesy trwałe” (NCN, konkurs SONATA BIS). Tematycznie związany z tymi projektami jest również grant obliczeniowy „Rare-earth free hard magnetic materials” (Poznańskie Centrum Superkomputerowo-Sieciowe).

Habilitant zrecenzował 20 prac dla czasopism naukowych objętych bazą WoS.

#### **Aktywność dydaktyczna, organizacyjna, popularyzatorska**

Habilitant brał czynny udział w organizacji konferencji Physics of Magnetism w 2011 i 2017 roku. Wygłosił wykład dla doktorantów Międzynarodowego Studium Doktoranckiego w IFM PAN w 2018 r. W latach 2017-2018 r. prowadził laboratorium specjalistyczne dla studentów Wydziału Fizyki Technicznej Politechniki Poznańskiej. Pełnił również rolę promotora pomocniczego doktoranta, który obronił pracę w Instytucie Fizyki Molekularnej PAN oraz był promotorem pracy magisterskiej obronionej na Wydziale Fizyki Technicznej Politechniki Poznańskiej.

Po dokonanej ocenie stwierdzam, że osiągnięcie naukowe dr. inż. Mirosława Werwińskiego oraz cały pozostały jego dorobek naukowy przedstawiony do oceny spełnia wymogi ustawowe i zwyczajowe stawiane kandydatom do tytułu doktora habilitowanego. Wnoszę do Komisji Habilitacyjnej o dopuszczenie pana dr. inż. Mirosława Werwińskiego do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

*Małgorzata Pyrczowa-Michalska*