

Recenzja dorobku naukowego oraz rozprawy habilitacyjnej

Tytuł rozprawy: **Modelowanie materiałów magnetycznych z wykorzystaniem teorii funkcjonału gęstości**

Autor: **dr. inż. Mirosław Werwiński**

Dr. inż. Mirosław Werwiński ukończył studia w roku 2006 na Wydziale Fizyki Technicznej Politechniki Poznańskiej uzyskując stopień magistra inżyniera fizyki technicznej. Tytuł pracy magisterskiej to *Badanie własności elektronowych i magnetycznych związków uranu $UCoAs_2$, UCo_4B i U_5Ge_4 w oparciu o obliczenia abinitio*.

W roku 2007 uzyskał stypendium z programu *Marie-Curie Psi-k training* które sfinansowało jego miesięczne szkolenia naukowe w: /i/ Lyonie (czerwiec 2007), /ii/ San-Sebastian, Hiszpania (lipiec 2007), /iii/ oraz pobyt na szkole nanomagnetyzmu i spintroniki (wrzesień 2008, Praga). Poza stypendium Marii-Curie dochodzą do tego szkolenie w Juelich (marzec 2007), workshop w Krakowie (IFJ PAN, grudzień 2007), workshop dotyczący pakietu programów WIEN2k (marzec 2008, Wiedeń) i workshop dotyczący pakietu FPLO (sierpień 2008, IFW Dresden) oraz krótki 2-tyg. kontrakt w Instytucie Leibniza w Dresden (listopad 2008).

Równolegle do zaawansowanych szkoleń dr Werwiński do roku 2008 uczestniczył (jako wykonawca) w realizacji dużego polsko-niemieckiego grantu dotyczącego badania magnetycznych własności metastabilnych związków i stopów międzymetalicznych w oparciu o metody abinitio.

Jako logiczna kontynuacja powyższych badań – do roku 2010 uczestniczył w realizacji grantu finansowanego przez MNiSW a zajmującego się własnościami elektronowymi i magnetycznymi związków

międzymetalicznych metali przejściowych z powłokami f-elektronowymi. W roku 2010 uzyskał grant promotorski na napisanie doktoratu.

Rozprawę doktorską *Obliczenia z pierwszych zasad własności elektronowych i magnetycznych wybranych związków międzymetalicznych zawierających cer, samar i uran* obronił w roku 2011 w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauki w Poznaniu. Promotorem był dr hab Andrzej Szajek , profesor IFM PAN. W roku 2012 dr Werwiński uzyskał stopień adiunkta w Zakładzie Teorii Ciała Stałego IFM PAN. W okresie 2011-2012 równoległe do swojej pracy doktorskiej dr Werwiński uczestniczył w kolejnym polsko-niemieckim grantie dotyczącym badania własności magnetycznych stopów na bazie YCo_2 (w różnych stanach krystalicznych).

Pod koniec roku 2012 wyjechał na 3-letni staż naukowy (postdoctoral researcher) na Wydziale Fizyki i Astronomii Uniwersytetu w Uppsali gdzie zajmował się głównie problemami związanymi z materiałami magnetycznymi na bazie pierwiastków ziem rzadkich w ramach dużego projektu z 7 Programu Ramowego Unii Europejskiej obejmującego kilkanaście uczelni (między innymi uniwersytety w Uppsali, Wiedniu, Madrycie, Dresden, Darmstadt).

W roku 2014 (tuż przed ukończeniem pobytu w Uppsali) dr Werwiński rozpoczął pracę nad swoją rozprawą habilitacyjną. Jej tytuł to *Modelowanie materiałów magnetycznych z wykorzystaniem teorii funkcjonatu gęstości*. Składa się na nią 8 bardzo dobrych i tematycznie ściśle powiązanych publikacji w J. Alloys Compd., Computer Mater. Sci., Phys Rev. B, J. Phys. D: Appl. Phys. Celem pracy jest wyjaśnienie z pierwszych zasad (bez fenomenologicznych, dopasowywanych do eksperymentu parametrów) obserwowanych własności fizycznych: strukturalnych, elektronowych i magnetycznych wielu związków magnetycznych. Jako szczególne osiągnięcia rozprawy mające zarówno znaczenie teoretyczne jak i praktyczne (konkretne zastosowania inżynierskie) należy wymienić: /i/ wyjaśnienie wpływu domieszkowania na materiały stosowane w elektrodach do nowej generacji akumula-

torów niklowo-metalowo-wodorkowych, /ii/ określenie konkretnych wymagań do poprawnego opisu elektronów f w kilku ważnych związkach uranu (w ramach modelowania z użyciem DFT), /iii/ kompleksowe przebadanie składników (z wykluczeniem popularnych lecz niezwykle drogich pierwiastków ziem rzadkich) na nowe magnesy trwałe. Punkty pierwszy i trzeci potencjalnie mogą mieć impact ekonomiczny na gospodarkę (w sektorze nowoczesnych rozwiązań i innowacyjnych technologii).

Jak już powyżej wspomniano dr Werwiński jest współautorem 8 prac składających się na rozprawę habilitacyjną. Po zapoznaniu się z odpowiednimi oświadczeniami, biorąc ponadto pod uwagę niezwykłą pracowitość modelowania kwantowego (wykluczając pracę indywidualną, praca grupowa jest tu absolutną koniecznością) z przekonaniem stwierdzam, że indywidualny wkład dr Werwińskiego w powstanie w. wym. 8 prac jest wystarczający na dobrą i wartościową rozprawę habilitacyjną. Co więcej, szeroka i udana współpraca naukowa zarówno z krajowymi jak i z zagranicznymi naukowcami, zaowocowała wyższym poziomem publikacji i pełniejszą oraz szybszą realizacją podejmowanych projektów naukowych.

Poza wymienionymi pracami dr Werwiński jest współautorem 34 dobrych i interesujących prac naukowych które adresują: /i/ badania materiałów na elektrody do nowej generacji akumulatorów niklowo-metalowo-wodorkowych, /ii/ modelowania różnych materiałów zawierających uran, /iii/ badania materiałów na magnesy trwałe bez stosowania pierwiastków ziem rzadkich, /iv/ badania magnetokaloryków (fazy Lavesa oparte o YCo_2 , /v/ badania związków zawierających cer, /vi/ inne poboczne zagadnienia np. badania nad układami f -elektronowymi itp.

Szczególną cechą większości prac (zarówno tych wchodzących w skład rozprawy hab. jak i tych pozostałych) jest ścisły związek z eksperymentem, prace te zawierają jednocześnie dane doświadczalne jak i ich interpretację na gruncie przeprowadzonego modelowania.

Jeżeli idzie o liczbę cytowań i indeks Hirscha dr Werwinskiego to w mojej opinii są one typowe dla

habilitacji z fizyki. W tym miejscu należy wziąć pod uwagę specyfikę opracowywanych zagadnień i stosowanego warsztatu obliczeniowego. Powstanie poszczególnych prac wiąże się z tak dużym nakładem pracy koncepcyjnej i nakładem pracy obliczeniowej, że niewiele grup badawczych jest w stanie podejmować podobne zagadnienia. Dlatego właśnie w tej dziedzinie jest stosunkowo mało cytowań w porównaniu do innych “bardziej popularnych” działów fizyki. Gdyby (hipotetycznie) uwzględnić na to poprawkę, to liczba cytowań i indeks Hirscha dr Werwińskiego powinny ulec przemnożeniu przez czynnik 1.5 (oczywiście, z mojej strony jest to czysto intuicyjne oszacowanie). W tym miejscu warto także podkreślić wyjątkowo dużą aktywność habilitanta w realizację Grantów zarówno krajowych jak i międzynarodowych.

Dydaktyka

Dr Werwiński prowadził 3 semestrowe laboratorium specjalistyczne (studia stacjonarne II stopnia) *Badanie własności fizycznych układów nieuporządkowanych metodami symulacji komputerowych* w ramach współpracy między Politechniką Poznańską a IFM PAN.

Ponadto prowadził wykład dla doktorantów pt. *Korelacje elektronowe i modelowanie układów w skali atomowej*. Był opiekunem i promotorem pracy magisterskiej na Politechnice Poznańskiej (magistrant zdobył Diamentowy Grant 2018), oraz opiekunem naukowym i promotorem pomocniczym dwóch doktoratów (IFM PAN).

Biorąc pod uwagę zatrudnienie w PAN a więc utrudniony (w stosunku do pracowników Uniwersytetów) kontakt ze studentami fizyki powyżej wymienione osiągnięcia dydaktyczne oceniam pozytywnie.

Inne osiągnięcia naukowe i zawodowe

Dr Werwiński kieruje małym ale aktywnym zespołem badawczym. Jest współodpowiedzialny za

utrzymanie i rozbudowę dużego klastra obliczeniowego. Rozbudowuje i uruchamia nowe oprogramowanie naukowe.

Należy zauważyć aktywność habilitanta w recenzowaniu publikacji w prestiżowych czasopismach fizycznych co niewątpliwie świadczy o międzynarodowym uznaniu jego kompetencji naukowych.

W końcu (jako dosyć wyjątkowe) należy podkreślić współpracę z przemysłem (produkcja magnesów i materiałów magnetycznych).

Współpraca międzynarodowa, uczestnictwo w konferencjach, workshopach i wykłady, uczestnictwo w realizacji grantów międzynarodowych

Fakty, wymienione przez habilitanta, załączone jako materiały pomocnicze do rozprawy to dosyć obszerne zestawienie. W mojej opinii habilitantowi należy się tutaj pozytywna ocena "z plusem".

Obecnie przejdę do skrótowego omówienia poszczególnych prac składających się na rozprawę

Prace będę omawiać nie wg. kolejności chronologicznej ale według ułożenia tematycznego (tak jak to zaproponował habilitant).

I. Badanie wpływu domieszek na właściwości stopów opartych o La_2Ni_7 ; prace J. Alloys Compd. 763, 951 (2018); J. Alloys Compd. 773, 131 (2019) stanowiące połączenie eksperymentu i modelowania ab initio

Stopy $\text{La}_{2-x}\text{Mg}_x\text{Ni}_7$ a także warianty tych stopów z dodatkiem gadolinu lub cobaltu są obiecującymi materiałami na elektrody do akumulatorów niklowo-metalowo-wodorkowych - odznaczają się odwracalną absorpcją/desorpcją wodoru.

Dr Werwiński był odpowiedzialny za zbadanie struktury i stabilności energetycznej poszczególnych stopów i wyznaczenie ich pasm walencyjnych. Ustalono zostało, że najlepsze własności elektrochemiczne i elektronowe posiada $\text{La}_{1.5}\text{Mg}_{0.5}\text{Ni}_7$ a następnie rozważano jak na w.wym. własności ma podstawianie za La gadolinu oraz podstawianie za nikiel cobaltu (analiza wpływu tych domieszek na gęstości stanów elektronowych w okolicy poziomu Fermiego).

II. Badania nad związkami uranu (prace: Comput. Mater Sci 134, 166 (2017); Comput. Mater Sci 81, 402 (2014); Phys. Rev. B90, 064430 (2014))

Prace te koncentrowały się na związkach UNi_xSb_2 , UCuSb_2 oraz URe_2Si_2 celem ustalenia sensownego przybliżonego opisu f-elektronów tak aby własności magnetyczne uranowców były opisywane prawidłowo. Najważniejsze wyniki przeprowadzonych obliczeń to: opracowanie metody modelowania układów warstwowych (z deficytami obsadzeń); wyznaczenie modeli struktury krystalicznej wybranych faz, wyznaczenie zależności stałych sieciowych od parametru x (jak np. w przypadku UNi_xSb_2); wyznaczenie struktury elektronowej (pasma walencyjne, gęstości stanów elektronowych, widmo fotoemisyjne dla X-ray) ustalenie podstawowej konfiguracji spinowej i uzyskanie zgodnej z eksperymentem wartości momentu magnetycznego na atomach uranu. W drugiej z w.wym. prac koniecznym stało się bardziej dokładne potraktowanie korelacji elektronowych więc habilitant zdecydował się na zastosowanie bardzo czasochłonnej metody GGA+U (poprawki od U_f - lokalnego kulombowskiego odpychania elektronów f na uranie). W trzeciej pracy interesujące było kompleksowe przebadanie anizotropii spinowej (wynikającej z oddziaływania spin-orbita).

III. Badania wybranych związków żelaza jako kandydatów na magnesy trwałe (prace: J. Phys.D: Appl. Phys. 50, 495008 (2017); Phys. Rev. B93, 174412 (2016); Phys. Rev. B98, 214431 (2018))

Celem badań było znalezienie tanich substytutów na magnesy trwałe (gdyż obecne ceny neodymu,

samaru czy innych pierwiastków ziem rzadkich używanych do wyrobu najlepszych magnesów są bardzo wysokie). Od strony modelowania kluczowe jest tutaj wyznaczanie energii magneto-krystalicznej co nie jest prostym zadaniem.

Pierwsza praca (patrz powyżej) jest czysto teoretyczna i dotyczy trudno wytwarzanego warstwowego związku FeNi (naprzemiennie warstwy Fe i Ni) będącego kandydatem jako materiał na magnesy trwałe. W pracy tej wykonano optymalizację struktury krystalicznej, obliczono moduł objętościowy, współczynnik magnetostrykcji, stałe anizotropii magnetycznej, powierzchnię Fermiego (relacje pomiędzy powierzchnią Fermiego a wkładami do anizotropii magnetokrystalicznej) oraz zależność energii magneto-krystalicznej od wektora falowego.

W drugiej pracy badano związki Fe_5SiB_2 oraz Fe_5PB_2 i Co_5SiB_2 (obliczanie gęstości stanów elektronowych, struktury pasmowej oraz zależności energii magneto-krystalicznej i momentów magnetycznych na atomach). Jako najważniejsze osiągnięcie tej pracy dr Werwiński określił opracowanie dwuwymiarowej mapy energii magneto-krystalicznej w zależności od stopnia domieszkowania x (jak np. w przypadku $(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_5\text{SiB}_2$) i od (ustalonego) momentu magnetycznego na jonach Fe. W szczególności z takiej mapy wynikało, że obiecującym materiałem na magnesy trwałe będzie $(\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3})_5\text{SiB}_2$ z domieszką metalu przejściowego typu 4d lub 5b jak np. Mo, W lub Re. Należy zauważyć, że do modelowania nieporządku chemicznego (dla różnych parametrów x) zastosowano tutaj dosyć prostą metodę VCA(virtual crystal approximation)

Trzecia praca (z par. III) jest dosyć podobna - koncentruje się na związkach $(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_5\text{PB}_2$. Wykorzystana tutaj została dokładniejsza metoda modelowania nieporządku chemicznego (metoda superkomórek) co pozwoliło zwiększyć dokładność oszacowania energii magneto-krystalicznej ale kosztem ogromnego zwiększenia kosztów obliczeniowych.

Zarówno dorobek naukowy jak i sama rozprawa habilitacyjna są w mojej ocenie wartościowe nie tylko jeśli patrzeć na nie od strony badań podstawowych ale i patrząc od strony konkretnych zastosowań.

Jej poziom naukowy, zwartość, kompletność, oraz obszerność opracowanych zagadnień są takie jak należy. Praca stanowi znaczący wkład w rozwój fizyki ciała stałego a w szczególności fizyki nowych materiałów i metod modelowania kwantowego.

Wymagane przez ustawodawcę elementy nowości i unikalności są w rozprawie obecne w stopniu większym niż jest to zwyczajowo przyjęte.

Krótko mówiąc jest to dobra i zrobiona szybko habilitacja. Recenzowanie jej było z mojej strony przyjemnością.

Reasumowując stwierdzam, że zarówno przedstawiona rozprawa jak i dorobek naukowy spełniają ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane przy habilitacji. Wnoszę więc o dopuszczenie dr Mirosława Werwińskiego do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.


prof. dr hab. Krzysztof Rościszewski

Instytut Fizyki UJ

ul. Łojasiewicza 11, Kraków

e.mail: krzysztof.roszczewski@uj.edu.pl