



Wrocław 14.02.2020r.

**Dr hab. inż. Paweł Scharoch**

Katedra Inżynierii Materiałów Półprzewodnikowych  
Politechnika Wrocławska

**Ocena osiągnięć naukowo-badawczych dr Mirosława Werwińskiego  
ubiegającego się o nadanie stopnia naukowego doktora  
habilitowanego**

Przedstawiona poniżej moja ocena dorobku naukowego dr inż. Mirosława Werwińskiego została wykonana w oparciu o przedstawione przez habilitanta dokumenty, w szczególności *Autoreferat* i *Wykaz dorobku*, oraz według wskazań stosownych aktów prawnych: Ustawy z dnia 14 marca 2003 roku o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule naukowym w zakresie sztuki (Dz.U. nr 65, poz.595, Dz.U. z 2005r., nr 164, poz. 1365, Dz.U. z 2011 r., nr 84, poz. 455); Rozporządzenia Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 1 września 2011, w sprawie kryteriów oceny osiągnięć osoby ubiegającej się nadanie stopnia doktora habilitowanego (Dz. U. Nr 196, poz. 1165).

Praca badawcza **Pana dr inż. Mirosława Werwińskiego** koncentrowała się od samego początku (z nielicznymi wyjątkami) na teoretycznych badaniach właściwości magnetycznych materiałów, przy użyciu obliczeń dużej skali opartych na teorii funkcjonału gęstości (DFT), zwanych też obliczeniami z zasad pierwszych lub 'ab initio'. Tytuł **Magistra inżyniera fizyki technicznej** uzyskał w 2006 roku, w Politechnice Poznańskiej, na Wydziale Fizyki Technicznej, przedstawiając pracę: *Badanie własności elektronowych i magnetycznych związków uranu: UCoAs<sub>2</sub>, UCo<sub>4</sub>B i U<sub>5</sub>Ge<sub>4</sub> w oparciu o obliczenia 'ab initio' struktury elektronowej*, a tytuł **Doktora nauk fizycznych** w 2011 roku, w Instytucie Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk, broniąc rozprawę *Obliczenia z pierwszych zasad własności elektronowych i magnetycznych wybranych związków międzymetalicznych zawierających cer, samar i uran*. Promotorem habilitanta w obu pracach był dr

hab. Andrzej Szajek, prof. IFM PAN. Po obronie doktoratu odbył 2.5 letni staż post-doktorski na **Wydziale Fizyki i Astronomii Uniwersytetu w Uppsali w Szwecji**, po czym został zatrudniony na stanowisku adiunkta w Zakładzie Teorii Ciała Stałego w **Instytucie Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk w Poznaniu**, gdzie pracuje do dzisiaj.

We wniosku habilitacyjnym, Pan dr inż. Mirosław Werwiński przedstawił 8 artykułów składających się na spójny fragment jego dorobku badawczego, przy czym spójność określają tu trzy aspekty:

- główna tematyka: właściwości materiałów magnetycznych
- aspekt aplikacyjny i ekonomiczny: szeroko pojęta energetyka, magazynowanie energii w różnych skalach (akumulatory nowej generacji), energia odnawialna (magnesy trwałe niezawierające metali przejściowych, do różnych zastosowań, w szczególności w turbinach elektrowni wiatrowych)
- narzędzie badawcze: metody obliczeniowe oparte na DFT, z wykorzystaniem różnych implementacji i przybliżeń.

Artykuły te opublikowane były w latach 2014-2019 w bardzo renomowanych czasopismach o międzynarodowym zasięgu: 3 w *Physical Review B*, 1 w *Journal of Physics D*, 2 w *Computational Material Science* i 2 w *Journal of Alloys and Compounds*. We wszystkich artykułach habilitant jest pierwszym autorem. Cztery z raportowanych prac miały charakter czysto teoretyczno-obliczeniowy, jednak wykonywane były w odniesieniu do znanych wyników doświadczalnych, a cztery prowadzone były we współpracy z zespołami doświadczalnymi, w tym także osobiście kierowanymi przez habilitanta. Oprócz tego, że wszystkie prace dotyczą materiałów magnetycznych, można w nich wyróżnić 3 grupy tematyczne: (i) (artykuły H1 i H2) stopy  $\text{La}_2\text{Ni}_7$ , materiały badane były pod kątem możliwości ich zastosowań do elektrod w akumulatorach niklowo-metalowo-wodorkowych (Ni-MH) nowej generacji (ii) (prace H3-H5) właściwości strukturalne i magnetyczne związków uranu oraz (iii) (artykuły H6 i H8) związki żelaza niezawierające pierwiastków ziem rzadkich badane pod kątem ich zastosowań jako magnesów trwałych. Badane były, metodami obliczeń z zasad pierwszych różnic, istotne z punktu widzenia zastosowań charakterystyki fizyczne układów, jak konfiguracje równowagowe faz i ich stabilności, struktury elektronowe i elektronowe gęstości stanów, stany ładunkowe, powierzchnie Fermiego, stany magnetyczne, widma XPS pasma walencyjnego, energie anizotropii magnetycznej (MAE), stałe anizotropii oraz współczynniki magnetostrykcji. Ze względu na trudności obliczeniowe związane z uwzględnieniem silnie skorelowanych elektronów w stanach  $f$  w ramach DFT, istotnych ze względu na właściwości magnetyczne, wykonywano przy okazji prowadzonych badań także testy różnych podejść do tej kwestii (poprawka na wewnętrzno-pasmowe odpychanie typu Hubbarda LDA+U/GGA+U lub dodatkowy potencjał uwzględniający wpływ orbitalnej polaryzacji, GGA+OP). Wiele badanych układów miało charakter stopów, co istotnie komplikuje obliczenia 'ab initio'. Znane są 3 podejścia do tego problemu: i) budowanie dużych superkomórek, na tyle dużych, aby w ramach periodycznej struktury można było symulować nieporządek chemiczny (np. stosując technikę SQS – *Special Quasirandom Structure*) lecz na tyle małych, aby zmieścić się w realistycznych zasobach obliczeniowych, ii) metoda przybliżenia kryształu wirtualnego (VCA), w której mieszanie odbywa się na poziomie pseudopotencjału, oraz iii) metoda wielokrotnego rozpraszania Korringa-Kohna-Rostokera (KKR) oparta na formalizmie funkcji Greena. Wszystkie trzy metody stosowane były w przedstawionych pracach, a ich wybór dyktowany specyfiką problemu. W obliczeniach stosowane były trzy kody o dużej międzynarodowej renomie, Wien2k (pełnopotencjałowy stosujący bazę fal płaskich), FPLO (pełnopotencjałowy stosujący bazy zlokalizowane) oraz SPR-KKR-FP (oparty na



metodzie wielokrotnego rozpraszania, pełnopotencjałowy). Wykonywanie obliczeń z wykorzystaniem w/w programów jest bardzo trudne technicznie i świadczy o doskonałym opanowaniu warsztatu obliczeniowego metod 'ab initio' przez habilitanta. W przedstawionym autoreferacie badania raportowane we wszystkich pracach są obszernie omówione, z dużym stopniem szczegółowości. Na podkreślenie zasługuje fakt, że teoretyczno-obliczeniowe prace były wykonywane zawsze w odniesieniu do wyników doświadczalnych, albo pozyskiwanych z literatury, albo w ścisłej współpracy z grupami eksperymentalnymi, w tym także kierowanymi osobiście przez autora. Za najważniejsze wyniki spośród całego cyklu prac autor uznaje:

- wykazanie, iż w układzie URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> obraz zdelokalizowanych elektronów może prowadzić do anizotropii momentu magnetycznego typu Isinga (praca [H5]),
- opracowanie metody analizy energii anizotropii magnetokrystalicznej w połączeniu z analizą powierzchni Fermiego (prace [H6] i [H8]) oraz
- opracowanie metody pozwalającej na określanie optymalnych składów stopów do zastosowań jako magnesy trwałe na podstawie dwuwymiarowej mapy MAE(x, m) (praca [H7]).

Wydaje się, że przedstawione powyżej prace stanowią reprezentatywną próbkę tematyczną dla całej działalności naukowo-badawczej habilitanta. Działalność ta znajduje odzwierciedlenie w pozostałych przedstawionych publikacjach, w liczbie 34, z udziałem własnych od 10% do 80%, 52 prezentacjach konferencyjnych, w tym 12 referatach (jednym zaproszonym), 11 referatach w ośrodkach naukowych w kraju i za granicą, w tym dwóch zaproszonych. Pan dr inż. Mirosław Werwiński kieruje obecnie dwoma projektami badawczymi: SONATA BIS (finansowany przez Narodowe Centrum Nauki) i międzynarodowym HOMING (finansowany przez Fundację na rzecz Nauki Polskiej), jest też kierownikiem grantu obliczeniowego w Poznańskim Centrum Superkomputerowo-Sieciowym. Oprócz tego brał udział w 7 innych projektach badawczych jako wykonawca, w tym 2 międzynarodowych: polsko-niemiecki projekt bilateralny MNiSW – DAAD oraz projekt 7 Programu Ramowego Unii Europejskiej (*Rare-Earth Free Permanent Magnets - REFREPERMAG*), gdzie był zatrudniony w konsorcjum badawczym. W 2014 roku otrzymał 2 nagrody za działalność naukową: za najlepszy poster, przyznaną przez Komitet Organizacyjny konferencji INTERMAG w Dreźnie oraz za najlepszy projekt w toku, za projekt REFREPERMAG. Był członkiem komitetów organizacyjnych 4 konferencji międzynarodowych w tym 2 zagranicznych. Od 2015 roku jest członkiem *European Materials Research Society*. Był promotorem 1 pracy magisterskiej, która została wyróżniona a magistrant zdobył Diametowy Grant w 2018 roku. Był też promotorem pomocniczym lub opiekunem 2 prac doktorskich. Brał udział w wielu szkoleniach zagranicznych z zakresu podstaw teoretycznych i narzędzi obliczeń 'ab initio', m.in. *A hands-on tutorial on the SIESTA code* (czerwiec 2007, Lyon, Francja), *15th WIEN2k workshop* (2008, Wiedeń, Austria), *7th Tutorial Hands-on-FPLO*, (sierpień 2008, Drezno, Niemcy). W ramach projektów badawczych, w których brał udział odbywał krótkoterminowe staże (*Leibniz-Institut für Festkörper und Werkstoffforschung* Drezno, Niemcy; Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, Szwecja). Na uniwersytecie w Uppsali odbył 30-miesięczny staż post-doktorski. Zrecenzował łącznie 20 artykułów dla 10 czasopism z listy JCR. W zakresie pracy organizacyjnej jest współodpowiedzialny za rozbudowę klastra obliczeniowego w Zakładzie Teorii Ciała Stałego IFM PAN. Trzykrotnie był członkiem zespołów eksperckich i konkursowych. Współpracuje z dwiema firmami zagranicznymi związanym z produkcją lub zastosowaniami materiałów magnetycznych.

Podsumowując, jestem pod dużym wrażeniem działalności naukowej oraz dorobku publikacyjnego Pana dr inż. Mirosława Werwińskiego. Wartością dodaną jest sam autoreferat, stanowiący dobrze napisane i interesujące kompendium wiedzy o zjawiskach i materiałach magnetycznych (przynajmniej w zakresie zainteresowań autora), a także o stosowanych metodach obliczeniowych, mogące stanowić materiał dydaktycznych dla przyszłych adeptów sztuki.

W oparciu o powyższe omówienie dorobku naukowego i innych osiągnięć Pana dr inż. Mirosława Werwińskiego stwierdzam, że spełnia on wymagania stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego, zgodnie z Ustawą z dnia 14 marca 2003 o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz.U. nr 65, poz. 595, z późniejszymi zmianami) oraz Rozporządzeniem Ministra I Nauki Szkolnictwa Wyższego z dnia 1 września 2011, w sprawie kryteriów oceny osiągnięć osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego (Dz.U. nr. 196, poz. 1165), oraz wnioskuję o przyjęcie rozprawy habilitacyjnej i o dopuszczenie Pana dr inż. Mirosława Werwińskiego do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.



Dr hab. Paweł Scharoch