

POLITECHNIKA POZNAŃSKA		
WYDZIAŁ INŻYNIERII MATERIAŁOWEJ I FIZYKI TECHNICZNEJ		
DNIA	7 -01- 2025	DNIA
WPŁYNĘŁO		

DF-63/10/2025

Lublin, 16 grudnia 2024

prof. dr hab. Mariusz Krawiec
Katedra Fizyki Powierzchni i Nanostruktur
Instytut Fizyki
Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej
pl. M. Curie-Skłodowskiej 1
20-031 Lublin

**Recenzja rozprawy doktorskiej pana mgr. inż. Wojciecha Marciniaka
pt. „Influence of structure and composition on properties
of Fe-based magnetic materials – a DFT study”**

Rozprawa doktorska pana mgr. inż. Wojciecha Marciniaka została wykonana w Instytucie Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk w Poznaniu oraz na Wydziale Inżynierii Materiałowej i Fizyki Technicznej Politechniki Poznańskiej pod kierunkiem pana profesora Mirosława Werwińskiego.

Rozprawa została przygotowana w języku angielskim. Liczy 108 stron, z czego prawie połowa to reprints czterech artykułów naukowych oraz jednego preprintu arXiv, stanowiących podstawę ubiegania się p. Marciniaka o stopień doktora. Publikacje, ponumerowane cyframi rzymskimi od I do V, ukazały się w dobrych czasopismach naukowych o zasięgu międzynarodowym: Physical Review B, Journal of Alloys and Compounds oraz Journal of Magnetism and Magnetic Materials. Wszystkie prace (publikacje oraz manuskrypt) są wieloautorskie i liczą od dwóch do jedenastu autorów, przy czym w trzech pracach nazwisko p. Marciniaka figuruje na pierwszym miejscu listy autorów nieułożonej w kolejności alfabetycznej. Ten fakt oraz oświadczenia współautorów zamieszczone w rozprawie wskazują na istotny wkład doktoranta w przygotowanie tych prac. Rozprawa została podzielona na trzy rozdziały i dodatkowo, zgodnie z wymogami, opatrzona streszczeniem w języku polskim. Rozdział pierwszy to swoisty przewodnik lub wprowadzenie do tematyki dysertacji wraz z bardzo krótkim omówieniem publikacji, których kopie zostały zamieszczone w rozdziale drugim. Całość kończy podsumowanie, również popularnonaukowe oraz bibliografia zawierająca 91 pozycji. Sposób doboru źródeł dowodzi należytej staranności właściwej dla prowadzenia badań naukowych. Struktura pracy jest przejrzysta z logicznym podziałem na rozdziały i podrozdziały, chociaż osobiście mam pewne uwagi. Mianowicie, po spisie treści pojawia się tekst informujący o zawartości poszczególnych podrozdziałów pracy, który można traktować jako wstęp, ale nie nosi on żadnego tytułu. Co więcej, pierwszy akapit tego tekstu jest czymś w rodzaju dodatkowego streszczenia, które w dalszej części jest tylko odrobinę rozwinięte. W rezultacie czytając ten fragment dysertacji odnosi się wrażenie niepotrzebnego powtarzania informacji. Oczywiście, zawsze znajdują się też jakieś inne drobne uchybienia, jak np. zdanie bez orzeczenia zaczynające się od słów „Ten sam efekt ...” w streszczeniu, czy „1” zamiast „q” we wzorze (1.14). Należą one jednak do wyjątków. Można więc przyjąć, że strona redakcyjna nie budzi większych zastrzeżeń, a sama praca została napisana starannie.

Problematyka rozprawy dotyczy materiałów magnetycznych. Materiały te są wykorzystywane w wielu obszarach współczesnej technologii i można je znaleźć w urządzeniach o różnej skali wielkości. Na przykład stanowią one elementy ogromnych generatorów elektrycznych pracujących w elektrowniach wiatrowych, czy wodnych. Są obecne w rdzeniach różnej wielkości transformatorów elektrycznych, wszechobecnych silnikach elektrycznych, czy urządzeniach elektroakustycznych, jak mikrofony i głośniki. W skali nano wykorzystywane są do budowy pamięci magnetycznych, niektórych tranzystorów oraz innych urządzeń elektronicznych. Nie ma najmniejszej wątpliwości, że to m.in. materiałom magnetycznym zawdzięcza się ogromny postęp technologiczny, który dokonał się w kilku ostatnich dziesięcioleciach. To właśnie dzięki nim została zapoczątkowana, a następnie intensywnie rozwijana spintronika – gałąź nowoczesnej nanoelektroniki zorientowana na wykorzystanie spinowych stopni swobody. Ciągły postęp technologiczny wymaga poprawy wydajności projektowanych urządzeń elektronicznych przy jednoczesnym zmniejszaniu ich rozmiarów. Jednym z kierunków tego rozwoju jest poszukiwanie nowych materiałów magnetycznych, które sprostałyby wymaganiom współczesnej i przyszłej nanotechnologii. Pod uwagę muszą być brane nie tylko ich właściwości, ale także kwestie finansowe i geopolityczne. Innymi słowy, materiały te muszą być efektywne, tanie i szeroko dostępne. Pod tym względem problematyka dysertacji jest bardzo aktualna i ważna.

Praca doktorska poświęcona jest badaniom teoretycznym wybranych stopów żelaza. Badane materiały to m.in. wykazujące porządek ferromagnetyczny $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x$, Fe-Co-C , $\text{L1}_0 \text{FePt}$, $(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{B}$ oraz antyferromagnetyczny YbFe_4Al_8 . Wybór takich materiałów, których ogniwem łączącym jest żelazo, nie był przypadkowy. Wiąże się to z pierwiastkami ziem rzadkich, które niewątpliwie zdominowały materiały magnetyczne, a właściwie z kryzysem dotyczącym ich światowego rynku oraz nieprzerwanym wzrostem popytu na nie. Odpowiedzią na te wyzwania może być ponowne pochylenie się nad pomysłami i materiałami dobrze już znanymi. Przykładem może być $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x$, który powiększył rodzinę twardych materiałów magnetycznych niezawierających pierwiastków ziem rzadkich, czy stop Nd-Fe-B , zoptymalizowany pod kątem obniżenia zawartości tych pierwiastków.

Rozprawa koncentruje się na badaniach wpływu struktury atomowej oraz składu chemicznego na właściwości magnetyczne wymienionych stopów żelaza. W szczególności wyznaczono energie anizotropii magnetokrystalicznej, wartości orbitalnych i spinowych momentów magnetycznych oraz temperatury przejścia fazowego. Dokonano analizy wpływu odkształceń strukturalnych oraz uporządkowania krótko- i długozasięgowego na właściwości magnetyczne czystego i domieszkowanego węglem stopu $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x$. Zbadano efekt funkcjonalizowania matrycy $(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{B}$ ciężkimi domieszkami pierwiastków 3d, 4d i 5d. Ponownie przebadano materiał warstwowy $\text{L1}_0 \text{FePt}$ pod kątem właściwości magnetycznych, m.in. wyznaczono wartości energii anizotropii magnetokrystalicznej, wykorzystując dokładniejsze metody oraz różne zestawy parametrów obliczeniowych. Zaproponowano także kilka struktur o potencjalnie korzystnych charakterystykach w kontekście wykorzystania ich jako magnesy trwałe.

Rozdział pierwszy stanowi swoisty przewodnik, na co wskazuje także tytuł „Guide”, towarzyszący zestawowi prac będących podstawą ubiegania się p. Marciniaka o stopień doktora. Został on podzielony na pięć części. Podrozdział 1.1 zawiera motywację do podjęcia badań, ich cel oraz kontekst, w jakim należy rozpatrywać przedłożone publikacje doktoranta. Koncentruje się na sytuacji geopolitycznej i kruchym rynku pierwiastków ważnych dla rozwoju technologicznego. Żelazo jest wskazane jako wciąż żywą alternatywą dla pierwiastków ziem rzadkich i poparte przykładami. W dalszej części zdefiniowany został cel pracy, którym jest określenie wpływu składu chemicznego i struktury krystalicznej na właściwości magnetyczne wybranych stopów na bazie żelaza. W bardziej ogólnym i szerszym kontekście badania mają na celu wyjaśnienie procesów rządzących wkładem

strukturalnym na poziomie atomowym do charakterystyk magnetycznych, a w dalszej perspektywie znalezienie nowych użytecznych materiałów magnetycznych. W części 1.2 przedstawiono główne założenia wykorzystywanych w badaniach metod teoretycznych. Opis teoretyczny rozpoczęto od równania Schrödingera i krótkiego omówienia sposobów jego rozwiązania, mianowicie przybliżenia adiabatycznego oraz teorii Hartee-Focka. Następnie skupiono się na teorii funkcjonału gęstości (DFT), którą to doktorant stosował w swoich badaniach. W dalszej kolejności zdefiniowano wielkości charakteryzujące właściwości magnetyczne badanych układów. Wprowadzono pojęcie energii anizotropii magnetokrystalicznej (MAE). Krótko przedyskutowano problem temperatury, jako że standardowa DFT z definicji odnosi się tylko do stanu podstawowego. Niemniej jednak, posiłkując się dodatkowymi metodami, pewne właściwości temperaturowe mogą zostać otrzymane. Tak jest chociażby z temperaturą przejścia fazowego, czy wpływie temperatury na MAE. W dalszej części rozdziału pierwszego, oznaczonej jako 1.3, skupiono się na zagadnieniach związanych z implementacją DFT, do których można zaliczyć przybliżenia funkcjonału korelacyjno-wymienne, traktowanie spinu elektronu, czy problem obliczania potencjału efektywnego. Trochę uwagi poświęcono także metodom opisu nieporządku chemicznego. Na zakończenie krótko omówiono kody DFT wykorzystywane w całej pracy, a są to SPR-KKR (spin-polarized Korringa-Kohn-Rostoker) oraz FLPO (full-potential local-orbital). Podrozdział 1.4 poświęcony jest przedmiotowi badań, którym są wybrane stopy na bazie żelaza. Wymieniono różne metody zmian strukturalnych w celu poprawy właściwości magnetycznych materiałów. Jako przykład zmian strukturalnych indukowanych naprężeniami omówiono związek Fe-Co, dla którego przewidziano istnienie obszaru gigantycznej anizotropii magnetokrystalicznej, ale nie potwierdziły tego wyniki odpowiednich eksperymentów. Zastosowanie bardziej wyrafinowanych metod teoretycznych traktowania nieporządku chemicznego poprawiło zgodność z eksperymentem, a dodatkowo sugerowało znaczny wzrost MAE dla związku FeCo o uporządkowanej strukturze B2. Innym sposobem zwiększenia wartości MAE jest domieszkowanie układu atomami ciężkich pierwiastków z silnym oddziaływaniem spin-orbita. Przykładem może być związek $(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{B}$, badany wcześniej przez promotora rozprawy, domieszkowany pierwiastkami 3d, 4d i 5d. Ostatnim omawianym materiałem jest związek FePt o strukturze L_{10} , powierzchniowo-centrowanym odpowiedniku struktury B2. Przewodnik kończy się krótkim opisem prac [I-V]. Przedstawione zagadnienia są pomocne przy lekturze tych prac, chociaż zbyt często trzeba sięgać do źródeł. Jeśliby wskazać jakieś inne uwagi dotyczące tej części pracy, to czytając ją miejscami odnosi się wrażenie braku płynnego przejścia pomiędzy dyskutowanymi zagadnieniami, ale niestety także w ich obrębie. Niektóre fragmenty zawierają dość szczegółowe informacje, a inne tylko pobieżne. Na przykład można było pokusić się o szersze przedstawienie implementacji metod teoretycznych oraz porównanie kodów DFT wraz z ich zaletami, wadami i ograniczeniami. Część dotyczącą badanych materiałów także można było rozbudować o dodatkowe informacje, rysunki, czy wykresy. Z pewnością byłoby to z korzyścią dla czytelników mniej zaznajomionych z tematyką rozprawy. Niemniej jednak, treść przedstawionych zagadnień świadczy o bardzo dobrym opanowaniu warsztatu teoretycznego przez doktoranta.

Rozdział drugi to w zasadzie właściwa rozprawa doktorska. Zawiera przedruki artykułów naukowych [I, III-V] oraz manuskryptu [II] stanowiących podstawę ubiegania się pana mgr. inż. Wojciecha Marciniaka o stopień doktora, które teraz omówię. Zestaw prac został poprzedzony oświadczeniami autora o jego wkładzie w powstanie każdej z nich.

Pierwsza praca cyklu, zawarta w podrozdziale 2.1, to publikacja, której przedmiotem badań jest związek międzymetaliczny YbFe_4Al_8 . Jest to jedyny badany materiał, który w swoim składzie zawiera pierwiastek ziem rzadkich i wykazuje uporządkowanie antyferromagnetyczne. Zainteresowano się nim w pierwszych latach obecnego stulecia z powodu potencjalnych właściwości nadprzewodzących, które ostatecznie nie potwierdziły się. Natomiast obserwowano w nim zjawisko ujemnego namagnesowania,

co tłumaczono m.in. niezerowymi wartościami momentów magnetycznych na atomach iterbu. W pracy [I] podjęto próbę wytłumaczenia właściwości magnetycznych tego związku rozszerzając opublikowane trzy lata wcześniej przez inną grupę wyniki badań o opis w pełni relatywistyczny i uwzględnienie konfiguracji antyferromagnetycznej. W szczególności skupiono się wyznaczeniu struktury atomowej i odwzorowaniu konfiguracji elektronowej układu. Najbardziej stabilna okazała się konfiguracja antyferromagnetyczna charakteryzująca się ustawieniem momentów magnetycznych atomów żelaza w formie antyrównoległych łańcuchów. Dodatkowo okazało się, że magnetyzm występuje jedynie w sieci atomów Fe, co wydaje się przeczyć wcześniejszym sugestiom. Niestety, w zastosowanym podejściu nie da się tego jednoznacznie rozstrzygnąć, o czym doktorant pisze wprost w tejże pracy. Możliwe, że tak jest, ponieważ obliczenia nie są w stanie poprawnie wytłumaczyć odpowiednich widm XPS. W każdym razie praca dostarcza dodatkowych informacji o właściwościach badanego materiału. Na przykład wyjaśnia transfer ładunku pomiędzy podukładami, czy dyskutuje brak potrzeby uwzględnienia międzywęzłowego odpychającego oddziaływania kulombowskiego. Oczywiście rzuca też dodatkowe światło na problem magnetyzmu w związku YbFe_4Al_8 .

Manuskrypt [II] jest pierwszą z serii prac poświęconych materiałom na bazie żelaza z porządkiem ferromagnetycznym oraz wolnych od pierwiastków ziem rzadkich. W tym przypadku jest to związek Fe-Co, dla którego dwie dekady temu przewidziano bardzo duże wartości MAE, rzędu $800 \mu\text{eV}/\text{atom}$. Jednak późniejsze, bardziej wyrafinowane badania teoretyczne pokazały, że wartość ta powinna zostać czterokrotnie zmniejszona. Praca [II] skupia się na rozpatrzeniu zniekształcenia tetragonalnego w stopie Fe-Co i związanych z tym konsekwencji dla magnetyzmu. Jest to kolejne podejście do tematu, ponieważ doktorant opublikował już wcześniej jedną pracę dotyczącą nieuporządkowanego stopu Fe-Co. Mimo wszystko manuskrypt [II] zawiera szereg nowych i ciekawych wyników. W szczególności przebadano stabilność związku w szerszym zakresie deformacji tetragonalnych związku i wyznaczono wartości MAE, momentów magnetycznych oraz temperatury Curie. Dla stopu o wysokiej zawartości Co ściśniętej jednoosiowo została znaleziona struktura charakteryzująca się wysoką wartością MAE (ponad $200 \mu\text{eV}/\text{atom}$). Znajduje się ona w pobliżu struktury przejściowej bct_{10} na ścieżce transformacji $\text{bcc} \rightarrow \text{hcp} \rightarrow \text{fcc}$. Nie jest ona jednak stabilna, ponieważ całkowita energia tej struktury nie znajduje się w minimum energetycznym, a jedynie w punkcie siodłowym. Wymaga więc dodatkowych zabiegów w celu eksperymentalnej weryfikacji.

Jednym z potencjalnych sposobów stabilizacji materiałów o wymaganych strukturach krystalograficznych poddanych deformacjom jest domieszkowanie międzywęzłowe atomami innych pierwiastków. Publikacja [III] podnosi to zagadnienie w odniesieniu do związku Fe-Co modyfikowanego atomami węgla, ale nie jest ono nowe, gdyż podobne badania były już prowadzone wcześniej. W artykule [III] rozważano szczególny przypadek uporządkowanych struktur $(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{16}\text{C}$ w pełnym zakresie koncentracji x atomów Co. Wyniki obliczeń pokazały, że niektóre struktury wykazują obiecujące właściwości magnetyczne z szerokim maksimum MAE dla koncentracji Co w okolicach $x=0.5$ i rozciągającym się nawet do wartości $x = 0.25$. Dzięki uwzględnieniu dużej liczby różnych konfiguracji możliwe było skorelowanie energii anizotropii magnetokrystalicznej z entalpią mieszanina. Dużym wartościom MAE towarzyszy większa stabilność struktur. Obliczone wartości MAE są porównywalne z wynikami dla innych lekkich domieszek. Duża część dyskusji została poświęcona określeniu efektów krótko- i długozasięgowego porządku na właściwości magnetyczne. Czynnikiem, który najmocniej determinuje ogólne zachowanie MAE w stosunku do uporządkowania jest bezpośrednie chemiczne sąsiedztwo atomu domieszki. Zastosowana metoda uśredniania termodynamicznego pozwala na uzyskanie podstawowych charakterystyk magnetycznych z dość dobrą dokładnością.

Inna modyfikacja stopu na bazie Fe-Co dyskutowana jest w publikacji [IV]. Chodzi o domieszkowanie związku $(\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3})_2\text{B}$ atomami pierwiastków 3d, 4d i 5d. Podobnie jak poprzednio, nie jest to nowy temat, a problem ten był już badany nawet przez promotora omawianej rozprawy. Praca [IV] weryfikuje wcześniejsze wyniki na bazie bardziej zaawansowanych metod teoretycznych. Zawiera także obszerny komponent eksperymentalny. Pokazuje, że ze wszystkich przebadanych teoretycznie domieszek jedynie w przypadku układu domieszkowanego atomami Re uzyskuje się znaczący (blisko dwukrotny) wzrost energii anizotropii magnetokrystalicznej. Wcześniejsze obliczenia przewidywały także wzrost dla domieszkowania atomami W. Z tych powodów zbadano eksperymentalnie struktury $(\text{Fe}_{0.675}\text{Co}_{0.275}\text{Re}_{0.05})_2\text{B}$ oraz $(\text{Fe}_{0.675}\text{Co}_{0.275}\text{W}_{0.05})_2\text{B}$. Wykonano pomiary strukturalne, temperaturowe oraz magnetyczne. Jednak uzyskane wyniki, bez dalszej optymalizacji, są znacznie poniżej oczekiwań aplikacyjnych.

Ostatnia publikacja zestawu, oznaczona jako [V], dotyczy związku FePt należącego do rodziny faz L_{10} . Z powodu bardzo silnej anizotropii magnetokrystalicznej oraz wysokiej temperatury Curie jest on uważany za obiecujący materiał na nośniki zapisu magnetycznego. W tym przypadku również nie jest to jakiś nowy kierunek badań, gdyż właściwości magnetyczne tej fazy były już wielokrotnie analizowane. Niemniej jednak głównym celem pracy [V] była weryfikacja poprzednich badań oraz głębsze zrozumienie właściwości magnetycznych w oparciu bardziej wyrafinowane podejście teoretyczne i rozszerzony zakres badań. W zasadzie można powiedzieć, że wyniki przeprowadzonych obliczeń są zgodne z wartościami literaturowymi. Pozwalają jednak zrozumieć rozbieżności w literaturowych wartościach MAE. Wynikają one z różnych wartości momentów magnetycznych, które z kolei były rezultatem użycia w obliczeniach różnych funkcjonałów korelacyjno-wymiennych. Szczegółowa analiza MAE w funkcji momentu magnetycznego wskazuje na istnienie maksimum MAE dla wartości mniejszej niż równowagowa, co jest dość istotnym wynikiem w kontekście niezerowych temperatur.

W rozdziale trzecim zawarto krótkie podsumowanie badań, także w wersji popularnonaukowej, wraz ze wskazaniem najważniejszych wyników oraz wniosków. Jeśliby jednak doszukiwać się jakichś mankamentów tej części rozprawy, to niewątpliwie brak jakiegokolwiek wzmianki o perspektywach i kierunkach dalszych badań.

Podczas lektury rozprawy nasunęły mi się następujące uwagi i pytania:

- We rozdziale 1.3 na stronie 15 doktorant pisze, że uwzględnienie pełnego potencjału krystalicznego jest krytyczne dla obliczeń MAE. Jak należy to rozumieć?
- W publikacji [I] do określenia populacji elektronów wykorzystywano podejście oparte na obsadzeniach Mullikana. Wiadomo, że z definicji ta metoda jest bardzo wrażliwa na wybór bazy funkcji własnych. Stąd rodzi się pytanie. Na ile wiarygodne są wyniki obliczeń w tym zakresie?
- Obliczenia, których wyniki opisane zostały w pracy [I], wskazują na obecność niezerowych wartości momentów magnetycznych jedynie na atomach Fe. Natomiast niektóre scenariusze bazujące na wynikach eksperymentów dopuszczają także magnetyzm na atomach Yb. Dyskutując ten problem w publikacji autorzy dochodzą do wniosku, że potrzebny jest bardziej zaawansowany model teoretyczny. Jaki miałby to być model? W którą stronę powinien być rozszerzony? Czy problem ten nie może wiązać się z poprzednią uwagą?
- Zaproponowana w publikacji [II] nowa struktura stopu Fe-Co nie jest stabilna, ponieważ jej energia znajduje się w punkcie siodłowym, a nie w minimum powierzchni energii. W celu ustabilizowania struktury autor proponuje wykorzystanie domieszkowania międzywęzłowego i prowadzenia wzrostu epitaksjalnego na odpowiednim podłożu o sieci kwadratowej. Jakie konkretne podłoża byłyby potencjalnie najbardziej obiecujące w tym kontekście?

W podsumowaniu należy stwierdzić, że tematyka podjęta w rozprawie pana magistra inżyniera Wojciecha Marciniaka nie jest nowa, ale wciąż aktualna i napędzana głównie przez potrzeby aplikacyjne. Być może częściowo to jest powód, dla którego nie przedstawiono perspektyw i kierunków dalszych badań, o których wspominałem przed chwilą. Oczywiście te elementy nie są szczególnie istotne w odniesieniu do całej dysertacji. Nie są także wymogami formalnymi stawianymi rozprawom doktorskim, ale raczej zwyczajowymi, podkreślającymi wagę podejmowanych zagadnień. Ponieważ tematyka nie jest nowa, studiując tę rozprawę odniosłem wrażenie, że głównym celem pracy była reprodukcja znanych już wyników i ewentualne przetestowanie metod obliczeniowych. W zasadzie każda omówiona tutaj praca doktoranta jest ponownym spojrzeniem na wcześniejsze, opublikowane już i znane wyniki badań. Można by się zatem zastanowić, czy recenzowana rozprawa prezentuje „oryginalne rozwiązanie problemu naukowego”, co jest wymogiem ustawowym jaki powinna spełniać praca doktorska (art. 187 ust. 2 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, Dz. U. 2024 r., poz. 1571). Od prac doktorskich oczekuje się elementów nowatorskości, a nie odtwórczych. Z drugiej strony przedstawione do ocen artykuły, stanowiące właściwą rozprawę doktorską, zostały opublikowane w poważnych czasopismach naukowych po wcześniejszym ich zrecenzowaniu przez ekspertów. Zatem gdyby były tylko pracami odtwórczymi i nie zawierały nowych, ważnych i ciekawych wyników, zapewne nie zostałyby tam opublikowane. Moje opinia jest podobna. Pomimo moich wcześniejszych uwag krytycznych, uważam, że publikacje zawierają kilka nowych i ciekawych wyników, a niektóre wnioski można było sformułować właśnie dzięki ponownym badaniom z wykorzystaniem innych narzędzi obliczeniowych. Co więcej, można zaryzykować stwierdzenie, że badania prowadzone przez pana mgr. inż. Marciniaka są cenne dla społeczności naukowej. Jako dowód można przywołać publikację [V], która była już cytowana 8 razy od momentu jej ukazania się dwa lata temu, a więc została zauważona przez środowisko. Przypomnę jeszcze, że celem rozprawy doktorskiej było określenie wpływu składu chemicznego i struktury krystalicznej na właściwości magnetyczne wybranych stopów na bazie żelaza. To jest konkretny problem naukowy, który postawił doktorant i, w moim odczuciu, rozwiązał go w sposób oryginalny. Należy to uznać za jego osiągnięcie naukowe. Nie byłoby to możliwe, gdyby nie specjalistyczna wiedza doktoranta z zakresu fizyki materii skondensowanej, opanowanie zaawansowanych metod obliczeniowych oraz nabyte doświadczenie w prowadzeniu obliczeń z pierwszych zasad. W związku z tym stwierdzam, że recenzowana rozprawa spełnia zwyczajowe i ustawowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim i wnoszę o dopuszczenie doktoranta do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Marciniak