

Poznań, 6 maja 2025 r.

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. inż. Justyna Snarskiego-Adamskiego  
„Theoretical modelling of magnetic materials based on transition metals”****1. Podstawa prawna do przygotowania niniejszej recenzji**

Niniejszą recenzję przygotowałem na wniosek Rady Naukowej Instytutu Fizyki Molekularnej (IFM) Polskiej Akademii Nauk (PAN) w Poznaniu. Sporządzając recenzję, opierałem się na następujących regulacjach prawnych i dokumentach:

- 1) Ustawa z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. 2018 poz. 1668 z późniejszymi zmianami, w tym Dz. U. z 2024 r. poz. 1571, 1871, 1897.) – dalej Ustawa PSWiN;
- 2) Tryb działania i sposób postępowania w sprawie nadania stopnia doktora w Instytucie Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk (Uchwała Rady Naukowej IFM PAN nr 138/2024 z dnia 12 listopada 2024 r.) – dalej Uchwała IFM PAN;
- 3) Regulamin wyróżniania rozpraw doktorskich obowiązujący w Instytucie Fizyki Molekularnej PAN (Uchwała Rady Naukowej IFM PAN nr 138/2021 z dnia 29 kwietnia 2021 r.);
- 4) Uchwała Rady Naukowej IFM PAN nr 148/2025 z dnia 18 kwietnia 2025 r.;
- 5) Umowa o Dzieło nr NO/PD/1/2025 z dnia 3 marca 2025 r.

**2. Sylwetka doktoranta**

Pan mgr inż. Justyn Snarski-Adamski ukończył studia inżynierskie (I-go stopnia) i magisterskie (II-go stopnia) na Uniwersytecie Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie (UMCS). Pracę dyplomową pt. „Struktura elektronowa silicenu na powierzchni Au” napisał pod kierunkiem prof. dra hab. Mariusza Krawca uzyskując tytuł magistra (studia o profilu ogólnoakademickim w dyscyplinie nauki fizyczne na kierunku fizyka techniczna, Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki). W okresie swojej aktywności na UMCS Kandydat brał udział jako wykonawca w dwóch projektach badawczych Narodowego Centrum Nauki (NCN, w programach Opus 8 i Opus 15, kierownik – prof. dr hab. Mariusz Krawiec). Po ukończeniu studiów magisterskich p. mgr inż. Justyn Snarski-Adamski był słuchaczem w Poznańskiej Szkole Doktorskiej Instytutów Polskiej Akademii Nauk w IFM PAN, którą ukończył składając niniejszą dysertację. W trakcie studiów w szkole doktorskiej był głównym wykonawcą projektu NCN Preludium Bis 1 (kierownik – dr hab. Mirosław Werwiński, prof. IFM PAN) oraz projektu Narodowej Agencji Wymiany Akademickiej (program Preludium Bis NAWA).

Należy podkreślić, że p. mgr inż. Justyn Snarski-Adamski spełnia wymagania określone m. in. w par. 3 i 4 Uchwały IFM PAN, w tym dostarczył wymienione w tych zapisach dokumenty, z którymi mogłem się zapoznać, przygotowując niniejszą recenzję. W szczególności Doktorant załączył pozytywną, pisemną opinię na temat rozprawy sporządzoną przez promotora, dyplom ukończenia studiów drugiego stopnia (dyplom magistra), informacje o przebiegu i ukończeniu kształcenia w szkole doktorskiej oraz wykaz prac naukowych i wystąpień konferencyjnych

### **3. Formalne dane na temat rozprawy**

Pan mgr inż. Justyn Snarski-Adamski swoją rozprawę doktorską napisał w Zakładzie Teorii Nanostruktur i Materiałów Kwantowych IFM PAN w Poznaniu pod kierunkiem dra hab. inż. Mirosława Werwińskiego, prof. IFM PAN (promotor) oraz dr Justyny Rychły-Gruszeckiej (promotorka pomocnicza).

Przedstawiona do oceny rozprawa stanowi zbiór czterech publikacji naukowych napisanych w języku angielskim, opublikowanych w latach 2022 – 2024 w czasopismach o zasięgu międzynarodowym z bazy Journal Citation Reports (Web Of Science), uwzględnionych również w wykazie, o którym mowa w art. 186 ust. 1 pkt. 3a) Ustawy PSWiN – por. Komunikat Ministra Nauki z dnia 05 stycznia 2024 r. w sprawie wykazu czasopism naukowych i recenzowanych materiałów z konferencji międzynarodowych. Są to następujące prace (w kolejności prezentacji w rozprawie):

1. J. Snarski-Adamski, J. Rychły, and M. Werwiński, *Magnetic properties of 3d, 4d, and 5d transition-metal atomic monolayers in Fe/TM/Fe sandwiches: Systematic first-principles study*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 546, 168828 (2022) [100 pkt. MNiSW; 2YIF: 2,5; 5YIF: 2,5].
2. A. L. Ravensburg, M. Werwiński, J. Rychły-Gruszecka, J. Snarski-Adamski, A. Elskova, P. O. Å. Persson, J. Rusz, R. Brucas, B. Hjörvarsson, P. Svedlindh, G. K. Pálsson, and V. Kapaklis, *Boundary-induced phase in epitaxial iron layers*, Physical Review Materials 8, L081401 (2024) [70 pkt. MNiSW; 2YIF: 3,1; 5YIF: 3,4].
3. J. Snarski-Adamski, A. Edström, P. Zeiger, J. Á. Castellanos-Reyes, K. Lyon, M. Werwiński, J. Rusz, *Simulations of magnetic Bragg scattering in transmission electron microscopy*, Ultramicroscopy, 247, 113698 (2023) [140 pkt. MNiSW; 2YIF: 2,1; 5YIF: 2,5].
4. J. Snarski-Adamski and M. Werwiński, *Effect of transition metal doping on magnetic hardness of CeFe<sub>12</sub>-based compounds*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 554, 169309 (2022) [100 pkt. MNiSW; 2YIF: 2,5; 5YIF: 2,5]

W nawiasie dla każdego artykułu podałem aktualną punktację wg. listy czasopism Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego (MNiSW) oraz aktualny dwu- i pięcioletni współczynnik wpływu (ang. impact factor; 2YIF oraz 5YIF, odpowiednio) wg. bazy Web Of Science. Jakkolwiek dane bibliometryczne nie zastępują eksperckiej oceny zawartości ww. publikacji (którą przeprowadzę poniżej), to pokazują, że czasopisma, w których publikuje



Doktorant, mają dobrą rangę wśród periodyków fizycznych. Warto także podkreślić, że wszystkie wyżej wymienione prace zostały również umieszczone na serwerze preprintów arxiv, co zapewnia otwarty dostęp do ich pełnego tekstu oraz poszerza grono potencjalnych czytelników.

Łączna liczba autorów powyższych czterech prac zawiera się pomiędzy 2 a 12, w każdej z nich jednym ze współautorów jest promotor, a w dwóch pracach wśród współautorów jest również promotorka pomocnicza. W trzech z nich Doktorant jest pierwszym autorem oraz (w tych samych) autorem korespondencyjnym. W mojej ocenie wybór czasopism jest dokonany właściwie i służy rozpowszechnieniu przedstawionych wyników wśród fizyków fazy skondensowanej i magnetyzmu. Ponadto status i renoma czasopism odpowiada jakości prezentowanych wyników.

Układ pracy jest typowy dla rozprawy w postaci zbioru artykułów. Przedstawione publikacje są poprzedzone „przewodnikiem” liczącym 21 stron właściwego tekstu (łącznie 7 plus 72 strony uwzględniając zawarte publikacje oraz literaturę). Zasadnicza część tego „przewodnika” napisanego w języku angielskim, oprócz streszczenia w języku angielskim i polskim, zawiera następujące elementy: i) bardzo ogólny wstęp do badanych zagadnień, w tym hipotezy zweryfikowane w rozprawie (rozdział 1), ii) zwięzły opis metod teoretycznych i obliczeniowych użytych przez Doktoranta w rozprawie (rozdział 2), iii) krótką dyskusję wyników opublikowanych w czterech pracach (rozdział 3), oraz iv) podsumowanie i wnioski (rozdział 4). Następnie załączone są teksty opublikowanych prac (rozdział 5) oraz dodatki i bibliografia użyta w „przewodniku” licząca 34 pozycje, bez pozycji wymienionych w prezentowanych pracach.

W tym miejscu należy nadmienić, że cała praca doktorska, tzn. zarówno zwięzły „przewodnik” jak i cztery opublikowane artykuły wchodzące w skład rozprawy, jest napisana w sposób staranny i czytelny w języku angielskim, a skróty myślowe są nieliczne. Publikacje są bogato ilustrowane za pomocą złożonych diagramów i wykresów w kolorze, w przeciwieństwie do „przewodnika”, który ma formę czystego tekstu.

Dodatkowo do pracy Kandydat dołączył, zgodnie z par. 5, ust 3, pkt. 1) Uchwały IFM PAN pisemne oświadczenia określające jego indywidualny wkład w powstanie publikacji oraz oświadczenia pozostałych współautorów o ich wkładzie. Niestety jestem zmuszony zauważyć, że dołączone oświadczenia często nie są w pełni zgodne z informacjami o wkładzie współautorów opublikowanymi wraz z pracami, a także utrudniają określenie w sposób jednoznaczny wkładu Doktoranta w powstanie tych publikacji, czyli określenie części wyników, które wchodzą w skład rozprawy i które mają podlegać ocenie recenzenta w niniejszym postępowaniu w sprawie nadania stopnia doktora (zgodnie z art. 187, ust. 3 Ustawy oraz par. 5, ust. 2 Uchwały IFMPAN: pracą doktorską może być „samodzielna i wyodrębniona część pracy zbiorowej”). „Przewodnik” poprzedzający teksty publikacji tylko w pewnym stopniu rozwiewa te wątpliwości (szczegóły dyskutowane są poniżej).



#### **4. Ocena zawartości merytorycznej**

Tematyka cyklu publikacji dotyczy teoretycznych badań właściwości magnetycznych różnych układów (w szczególności zbudowanych głównie z atomów żelaza – prace 1, 2, 4; praca 3 zajmuje się innymi materiałami) i koncentruje się na wyznaczeniu anizotropii magnetokrystalicznej oraz momentów magnetycznych w analizowanych układach. We wszystkich pracach użyto metody obliczeniowej opartej na teorii funkcjonału gęstości zaimplementowanej w pakiecie „full-potential local-orbital” stworzonego w Leibnitz Institute for Solid State and Materials Research (Drezno, Niemcy). Wybrane narzędzie obliczeniowe korzysta z formalizmu Kohna-Shama w bazie zlokalizowanych orbitali. Jak wskazuje Doktorant w „przewodniku”, podejście to ma tę zaletę (w porównaniu do pakietów wykonujących obliczenia w bazie fal płaskich), że umożliwia analizę układów z większą liczbą atomów w superkomórce, korzystając z tych samych zasobów sprzętowych.

Cykl publikacji jest poprzedzony wcześniej wspomnianym „przewodnikiem”. Jest on niezwykle zwięzły. Celem takiego „przewodnika” powinno być nie tylko przedstawienie otrzymanych wyników, ale również „prezentacja ogólnej wiedzy teoretycznej kandydata w dyscyplinie naukowej” oraz uwypuklenie „umiejętności samodzielnego prowadzenia pracy naukowej” (cyt. za Uchwałą IFM PAN). W tym miejscu niestety muszę zauważyć, że rozdział 1 dysertacji jest tak ogólny, że nie ma wystarczającej wartości poznawczej i badawczej. Bardzo użyteczne i wartościowe dla czytelnika niezaznajomionego z konkretnymi klasami badanych układów i w ogólności problematyką anizotropii magnetycznej byłoby jego istotne rozbudowanie. Rozdział 1.1 dotyczący opisu magnetycznych materiałów zyskałby na bardziej szczegółowym opisie zachowania materiałów magnetycznych analizowanych w publikacjach cyklu. Opis różnic pomiędzy ferromagnetykiem, antyferromagnetykiem i ferrimagnetykiem jest zawarty zaledwie w jednym akapicie. Warto byłoby dodać w tym miejscu poglądowe rysunki prezentujące schematyczne ułożenie momentów magnetycznych w takich układach bądź wymienić przykładowe materiały wykazujące wspomniane porządki magnetyczne (wraz z odpowiednimi odnośnikami do prac oryginalnych) oraz wskazać, które z badanych przez Doktoranta układów wykazują te uporządkowania. Rozdziały 1.2 i 1.3 nie wpisują się wystarczająco logicznie w konstrukcję pracy. Rozumiem, że miały być one pewnego rodzaju uzasadnieniem podjęcia tematyki pracy w kontekście aplikacyjnym, ale niestety ich treść nie są zbyt przydatna dla czytelnika. To, że takie rozszerzenie jest możliwe, pokazują wstępy publikacji zawartych w rozprawie doktorskiej. Szkoda, że Doktorant z tego nie skorzystał i zawartego tam materiału nie rozbudował.

Rozdział 2 opisujący zastosowane metody teoretyczne oceniam zdecydowanie lepiej niż część dyskutowaną wcześniej. Przegląd zaprezentowano najważniejsze zagadnienia dotyczące użytych teorii do badanych materiałów. W szczególności rozdział 2.1 dotyczący teorii funkcjonału gęstości w sposób przystępny prezentuje kluczowe idee niezwykle ważnej metody, która ma uniwersalne zastosowanie do opisu bardzo różnych klas materiałów. W rozdziale 2.2 opisującym metodę „wieloplastrową” (ang. multislice method) symulacji elektronowej mikroskopii tunelowej i jej uogólnienie na układy magnetyczne brakuje według mnie opisu związku z teorią funkcjonału gęstości. Jednocześnie rozdział 2.2.2 (dotyczący



wyznaczania potencjału wektorowego i indukcji pola magnetycznego w badanym układzie) i 2.2.3 (opisującym uwzględnienie w symulacji kwantowych wzbudzeń fononowych) mogłyby być bardziej rozbudowane i zawierać więcej szczegółów wraz z odniesieniami do prac oryginalnych.

Główną częścią dysertacji są oryginalne wyniki opublikowane w czterech artykułach naukowych, które są opisane syntetycznie w rozdziale 3, a ich pełne teksty zawarte są w rozdziale 5. Przedyskutuję je w innej kolejności niż to zrobiono w dysertacji, zachowując jednak ich numerację z rozprawy.

Praca 1 [J. Magn. Magn. Mat. 546, 168828 (2022)] jest pracą teoretyczną poświęconą analizie właściwości magnetycznych monowarstw zbudowanych z atomów metali przejściowych otoczonych z obu stron żelazem w strukturze regularnej przestrzennie centrowanej (założona grupa przestrzenna heterostruktury to  $P4/mmm$ , nr 123). Przeanalizowano 30 różnych układów, dla których wyznaczono: (i) energię anizotropii magnetokrystalicznej (ang. magnetocrystalline anisotropy energy, MAE), (ii) całkowity moment magnetyczny (tj. moment magnetyczny superkomórki), (iii) spinowy moment magnetyczny na atomie metalu przejściowego oraz (iv) orbitalny moment magnetyczny na atomie metalu przejściowego. Do dalszej szczegółowej analizy wybrano heterostrukturę z atomami platyny, która wykazuje największą anizotropię magnetyczną. Przeanalizowano zależność spinowego momentu magnetycznego na atomach oraz ewolucję elektronowej gęstości stanów i wkładu elektronów z orbitalu d poszczególnych atomów do całkowitej gęstości stanów (obie w funkcji odległości od monoatomowej warstwy zbudowanej z platyny).

Praca 4 [J. Magn. Magn. Mat. 554, 169309 (2022)] zawiera rezultaty obliczeń dla materiałów bazujących na związku  $CeFe_{12}$ . Artykuł rozpoczyna się analizą właściwości magnetycznych wyjściowego układu  $CeFe_{12}$  (grupa przestrzenna  $I4/mmm$ , nr. 139, komórka tetragonalna) z zastosowaniem obliczeń przy ustalonym spinowym momencie magnetycznym, co pozwala na zbadanie zależności anizotropii magnetokrystalicznej w funkcji momentu magnetycznego (dla różnych potencjałów wymiennych) i ich porównanie z materiałem  $LaFe_{12}$ . Następnie podstawiono jeden z atomów żelaza w pozycji 8i atomem tytanu Ti, co umożliwiło skonstruowanie pięciu nierównoważnych struktur rombówych o symetriach  $Amm2$  (nr 38),  $Ama2$  (nr 40),  $Imm2$  (nr 44),  $Pmmm$  (nr 47),  $Pmmn$  (nr 59). Porównanie energii wymienionych pięciu struktur pozwala na stwierdzenie, że struktura  $Pmmn$  (nr 59) ma najniższą energię i w dalszej analizie związków typu  $CeFe_{11}X$  rozważana jest wyłącznie ta struktura. Postępując analogicznie jak w pierwszej dyskutowanej pracy, przeanalizowano teoretycznie 30 różnych materiałów  $CeFe_{11}X$ , podstawiając za X kolejne atomy metali przejściowych. Następnie zbadano 30 różnych materiałów  $CeFe_{10}X_2$ , przy czym tutaj założono, że ich struktura opisywana jest przez grupę przestrzenną  $P4/mmm$  (nr 123, układ rombowy). Interesującym jest również przeanalizowanie niektórych związków  $CeFe_{11}X$ , gdzie X jest lekkim pierwiastkiem: H, C, N, B, N. Dla większości analizowanych materiałów w niniejszej pracy zaprezentowano podobne parametry fizyczne jak w pracy 1.



Mój podziw budzi liczba przeanalizowanych układów, a także dyskusja użycia różnych potencjałów i wykonanie obliczeń przy ustalonym momencie magnetycznym.

Dwa powyższe artykuły są skonstruowane bardzo podobnie i zawierają analizę właściwości magnetycznych dużej liczby materiałów. Systematycznie analizuje się w nich różne układy podstawiając w wybranych miejscach różne atomy metali przejściowych (z walencyjnymi elektronami d). Warto wspomnieć, że wyznaczone wielkości przedstawiono również w formie tabel, a nie tylko w formie graficznej w postaci rysunków, co może ułatwić odczytanie znalezionych wartości i ich porównywanie z wynikami innych autorów. Niemniej jednak w pracach tych brakuje w mojej opinii odniesienia do wyników eksperymentalnych (z wyjątkiem tabeli 4 w pracy 4, która dotyczy parametrów eksperymentalnych  $\text{CeFe}_{11}\text{Ti}$ ), ewentualnie wskazania, jakie układy spośród rozważanych w tych pracach zostały zsyntezowane lub mogą zostać zsyntezowane.

Praca 2 [Phys. Rev. Mat. 8, L081401 (2024)] jest pracą wieloautorską powstałą we współpracy z grupą eksperymentalną, która dotyczy analizy właściwości strukturalnych i magnetycznych cienkich warstw żelaza. Na wyróżnienie zasługuje fakt, że artykuł ten został opublikowany w formie listu (ang. „letter”), która jak piszą edytorzy czasopisma „jest zarezerwowana dla ważnych artykułów prezentujących oryginalne wyniki, które są kompletne i dostępne dla szerokiego grona odbiorców”. Wyniki obliczeń teoretycznych z użyciem teorii funkcjonału gęstości zostały zaprezentowane w głównym tekście pracy na rys. 2(b) oraz w materiałach dodatkowych (rys. S8 i S10). Analizowany teoretycznie układ jest warstwą zbudowaną z kilku monowarstw atomów żelaza umieszczoną w próżni (geometria tzw. „slabu”). Optymalizując położenia atomów oraz parametry superkomórki pokazano, że w zależności od liczby monowarstw w badanym układzie, uporządkowanie atomów może wykazywać strukturę tetragonalną (liczba monowarstw do 8 włącznie) lub regularną (liczba monowarstw od 9) – por. rys. S8. Następnie wyznaczono parametr  $c$  tetragonalnej komórki monowarstwy dla ustalonych parametrów  $a$  (rys. S10). Dodatkowo, w rozprawie doktorskiej (rozdział 3.2), Doktorant zamieszcza (jako rys. 3.1) nieopublikowane wyniki obliczeń: (i) energii całkowitej, (ii) parametru sieci  $c$ , (iii) spinowego momentu magnetycznego oraz (iv) anizotropii magnetycznej jako funkcji parametru sieci  $a$  oraz liczby monowarstw. Wyniki te i ich dyskusja pokazują głębokie zrozumienie przez Doktoranta analizowanego zagadnienia.

Praca 3 [Ultramicroscopy, 247, 113698 (2023)] dotyczy analizy teoretycznej zdecydowanie innych zagadnień, niż te poruszone we wcześniej dyskutowanych artykułach i jest związana dość luźno tematycznie z artykułami opisanymi wcześniej. Mam wrażenie, że została ona dołączona do dysertacji trochę „na siłę”, jednocześnie rozumiem chęć Doktoranta jej zawarcia w rozprawie jako pracy powstałej w międzynarodowym zespole (podczas realizacji stypendium finansowanego przez NAWA). W artykule analizowane są dwa materiały wykazujące porządek antyferromagnetyczny o następujących wzorach chemicznych  $\text{NiO}$  oraz  $\text{LaMnAsO}$ . W układach tych przeanalizowano magnetyczne rozpraszanie Bragg’a w elektronowej mikroskopii transmisyjnej. Obliczenia teoretyczne oparte są na metodzie rozwiniętej przez współautorów tej pracy (por. odnośniki [17,18, 23] z tego artykułu), która może zostać zastosowana również w skończonych temperaturach. Dużą zaletą jest



bezpośrednie odniesienie się do literaturowych wyników eksperymentalnych dla tlenku niklu oraz przewidywania dla drugiego materiału, które mogłyby zostać wykorzystane przez zespoły doświadczalne. Niestety nie jest dla mnie jasne czy w ramach badań prowadzących do rezultatów przedstawionych w pracy 3 wykonano obliczenia w ramach teorii funkcjonału gęstości (jeśli tak, to jakie?).

Do najważniejszych wyników zaprezentowanych w dysertacji zaliczam:

- 1) systematyczne zbadanie właściwości magnetycznych heterostruktur żelazo - metal przejściowy - żelazo oraz układów  $\text{CeFe}_{11}\text{X}$ ,  $\text{CeFe}_{10}\text{X}_2$  (X - pierwiastek z grupy metali przejściowych);
- 2) określenie struktury cienkiej warstwy żelaza w funkcji liczby monowarstw i teoretyczne wyjaśnienie przejścia strukturalnego do fazy tetragonalnej zaobserwowanego eksperymentalnie w analizowanym układzie;
- 3) opis magnetycznego rozpraszania Bragg'a w elektronowej mikroskopii transmisyjnej, szczególności zweryfikowanie otrzymanych wyników eksperymentalnych dla tlenku niklu.

Na szczególne podkreślenie zasługuje fakt, że Doktorant w pracach 2 oraz 3 odnosi się do wyników eksperymentalnych, które są pewnego rodzaju testem zastosowanych modeli teoretycznych.

W tym miejscu chciałbym podnieść kwestię oświadczeń dołączonych do dokumentacji. Oświadczenia dostarczone przez Kandydata powinny „określać jego indywidualny wkład w powstanie publikacji”, a oświadczenia pozostałych współautorów powinny stanowić o „ich wkładzie w powstanie publikacji”. Dokonując lektury załączonych oświadczeń muszę stwierdzić, że nie są one w pełni jednoznaczne. Autor rozprawy i pozostali współautorzy posługują się opisem hasłowym zgodnie z konwencją CRediT (ang. Contributor Roles Taxonomy). Niestety taki opis, pomimo że jest używany przez wielu wydawców, jest niewystarczający w moim odczuciu w kontekście postępowania o stopień naukowy. Oświadczenia takie powinny konkretnie opisywać wkład każdego z autorów, np. autor X wykonał obliczenia za pomocą metody Y dla materiału Z, wskazując wyznaczone wielkości (jeśli nie byłyby to wszystkie).

W szczególności według oświadczeń dla pracy 1 mamy (posługuję się tutaj i dalej inicjałami współautorów): J.S.-A.: opracowanie pierwotnej wersji, wprowadzenie zmian redakcyjnych, analiza formalna, badania; J.R.-G.: wprowadzenie zmian redakcyjnych, analiza formalna; M. W.: opracowanie pierwotnej wersji, wprowadzenie zmian redakcyjnych, badania, zabezpieczenie środków na badania, opieka na badaniami. Jednocześnie dla pracy 4: J.S.-A.: opracowanie pierwotnej wersji, wprowadzenie zmian redakcyjnych, analiza formalna, badania; M. W.: opracowanie pierwotnej wersji, wprowadzenie zmian redakcyjnych, badania (obliczenia DFT), zabezpieczenie środków na badania, opieka na badaniami. Z tak skonstruowanych oświadczeń trudno określić czy wszystkie obliczenia były wykonane przez Doktoranta i która część obliczeń została przeliczona przez promotora, czy może

współautorzy podzielili się pracą na przykład wykonując obliczenia dla różnych materiałów. Należy również podkreślić fakt, że oświadczenia te są inne niż te opublikowane wraz z tekstem obu prac (i są korzystniejsze dla Doktoranta).

Ponadto dla pracy 2 (ograniczam się tu tylko do wkładu współautorów z grupy teoretycznej) mamy: J.S.-A.: opracowanie pierwotnej wersji, wprowadzenie zmian redakcyjnych, badania (obliczenia DFT), analiza formalna (DFT); J.R.-G.: wprowadzenie zmian redakcyjnych, analiza formalna, badania (obliczenia DFT); M. W.: opracowanie pierwotnej wersji, wprowadzenie zmian redakcyjnych, analiza formalna, badania (obliczenia DFT), zabezpieczenie środków na badania. Tak skonstruowane oświadczenia budzą tym większe wątpliwości co do wkładu Doktoranta niż w dwóch poprzednich pracach, ponieważ i) wszyscy członkowie grupy teoretycznej wykonywali obliczenia, ii) Doktorant jest wymieniony jako ostatni z członków grupy teoretycznej w liście autorów, iii) obliczenia są wykonane dla jednego materiału i nie jest sprecyzowane jakie konkretnie symulacje zostały wykonane przez każdego z teoretyków. Dodam, że oświadczenia współautorów z grupy eksperymentalnej są równie lakoniczne i przyjmuję, że pomimo ich deklaracji uczestnictwa w badaniach i analizie formalnej, wykonywali oni zadania związane z częścią eksperymentalną. Jednocześnie w pracy 3 współautorzy opisują swój wkład jako: J.S.-A.: opracowanie pierwotnej wersji, wprowadzenie zmian redakcyjnych, analiza formalna, badania; M.W.: opracowanie pierwotnej wersji, wprowadzenie zmian redakcyjnych, analiza formalna, badania, zabezpieczenie środków na badania. Wszyscy pozostali autorzy wspominają w swoich oświadczeniach, że brali udział w badaniach i analizie formalnej. J. R. dodaje dodatkowo informację o zabezpieczeniu finansowania oraz opiece na badaniami. W stosunku do opublikowanego w publikacji wkładu (który dla wszystkich siedmiu współautorów jest opisany dokładnie tak samo, tj. koncepcja i zaplanowanie badań, analiza i interpretacja danych, opracowanie pierwotnej wersji, wprowadzenie zmian redakcyjnych) żaden z autorów nie wspomina o wkładzie w powstanie koncepcji i planu badań.

Z powyższego opisu i analizy załączonych oświadczeń sporządzonych przez Doktoranta, pozostałych współautorów oraz opis wkładu współautorów opublikowany wraz z pracami (ostatnie dotyczy prac 1, 3 i 4) nie pozwalają na jednoznaczne określenie wkładu Doktoranta i konkretne wyszczególnienie Jego wkładu w powstanie prac zbiorowych składających się na rozprawę doktorską i budzą moje wątpliwości. Niemniej jednak, biorąc pod uwagę, że Doktorant jest pierwszym autorem trzech prac oraz ich autorem korespondencyjnym oraz biorąc pod uwagę opinię promotora dotyczącą rozprawy, przyjmę, że rzeczywisty wkład mgr. inż. Justyna Snarskiego-Adamskiego w otrzymanie wyników teoretycznych przedstawionych w tych pracach był wiodący.

Po lekturze dysertacji nasuwają się następujące uwagi ogólne dotyczące metod badawczych użytych w dysertacji. Szkoda, że Kandydat nie pokusił się o ich dyskusję w „przewodniku”.



- W jaki sposób można odróżnić paramagnetyk od niemagnetyka na podstawie obliczeń w ramach teorii funkcjonału gęstości. Czy w ramach tego formalizmu można odróżnić paramagnetyk od ferromagnetyka i/lub antyferromagnetyka?
- W żadnym miejscu dysertacji nie jest poruszona kwestia stabilności badanych układów. Autor dysertacji rozważa wiele układów międzymetalicznych, w których założenie o periodycznym rozmieszczeniu podstawianych atomów (domieszek) może nie być w pełni uzasadnione (zwłaszcza w układach z pracy 4). Również heterostrukтуры rozważane w pracy 1 mogą być w ogólności niestabilne. Czy autor rozprawy może wskazać metody, które są w stanie rozstrzygnąć (w ramach użytego formalizmu) czy badany układ jest stabilny (tzn. jak można zbadać stabilność mechaniczną i dynamiczną danego układu)?
- Rozumiejąc, że struktura elektronowa nie była w centrum zainteresowania Doktoranta, brak prezentacji wyników dotyczących struktury elektronowej (za wyjątkiem pracy 1), zwłaszcza w kontekście cienkiej warstwy żelaza analizowanej w pracy 2 wzbudza pewien niedosyt. Wydaje się również, że analiza struktury elektronowej układów rozważanych w pracy 4 mogłaby być niezwykle ciekawa w kontekście zmian wywoływanych przez różne atomy metali przejściowych.

Ponadto oprócz wymienionych wyżej wątpliwości mam następujące uwagi szczegółowe do rezultatów zaprezentowanych w rozprawie:

- 1) W pracy 1 występuje stwierdzenie, że w badanych heterostrukturach z pierwiastkami Ag, Pd, Ir, Pt i Au znaleziono osobliwość van Hove wstępującą w elektronowej gęstości stanów (sekcja 4 artykułu oraz rozdział 3.2 dysertacji), która na rys. nr 5 w artykule jest praktycznie niewidoczna (zwłaszcza w całkowitej gęstości stanów). Mam wątpliwości czy wkład od elektronów 3d atomów żelaza Fe1 jest na tyle duży, że może mieć wpływ na makroskopowe własności transportowe takiej struktury.
- 2) W pracy 2 pojawia się parametr  $t_{Fe}$ , który jest zdefiniowany ja grubość warstwy żelaza. Czy nie jest on po prostu iloczynem odległości monowarstw i ich liczby?
- 3) Praca 4 zawiera pewne wyniki dla materiałów  $CeFe_{11}TiB$ ,  $CeFe_{11}TiN$  (np. tabela 6). Nie jest jasne dla mnie co oznacza taki zapis. Prawdopodobnie w położenia X w założonej strukturze  $CeFe_{11}X$  wstawiano np. atomy Ti i Ni. Ale takich miejsc jest cztery. Jak wybierano wzajemne położenia dwóch postawianych atomów? Czy wszystkie takie rozmieszczenia są równoważne? Podobne pytanie dotyczy rozmieszczenia domieszek dla przypadków zestawionych w tabeli 5 (w szczególności dla  $x = 0.5$ ).
- 4) Z powyższą uwagą związane jest też następujące pytanie: dlaczego dla materiałów  $CeFe_{10}X_2$  przyjęto, że ich struktura opisywana jest przez grupę przestrzenną P4/mmm (nr 123). Można by sobie przecież wyobrazić, że atomy X zajmują inne położenia atomów Fe, niż te prowadzące do grupy przestrzennej nr 123. Czy takie zagadnienie było analizowane? W pracy tej przeanalizowano przecież analogiczne zagadnienie dla układu  $CeFe_{11}X$ .



## **5. Podsumowanie i wniosek końcowy**

Podsumowując przedstawiona do oceny rozprawa doktorska, składająca się ze zbioru czterech publikacji opublikowanych w czasopiśmie o zasięgu międzynarodowym, **stanowi oryginalne rozwiązanie problemu badawczego**, jakim jest systematyczny teoretyczny opis i modelowanie materiałów magnetycznych na bazie metali przejściowych. Jest to problem z pogranicza fizyki oraz inżynierii materiałowej, którego rozwiązanie zaproponowane przez p. mgr. inż. Justynę Snarskiego-Adamskiego zostało niezależnie ocenione pozytywnie przez recenzentów wyżej wymienionych publikacji. **Rozprawa ta jest potwierdzeniem faktu, że autor potrafi samodzielnie prowadzić badania naukowe, a także jednocześnie prezentuje ogólną wiedzę teoretyczną Kandydata w dyscyplinie nauki fizyczne.**

W tym miejscu zasadne będzie również wspomnieć, że p. mgr inż. Justyn Snarski-Adamski jest współautorem dwóch innych artykułów naukowych podanych w Dodatku dostępnych na platformie arXiv (z czego jeden został już opublikowany po złożeniu rozprawy jako APL Materials 13, 021117 (2025)).

Reasumując, jednoznacznie stwierdzam, że pomimo wymienionych wyżej uchybień i wątpliwości (w szczególności tych dotyczących spójności i związku tematycznego pracy 3 z pozostałymi oraz szczegółowego wyodrębnienia wkładu Doktoranta w powstanie prac składających się na rozprawę), **rozprawa** pt. „Theoretical modelling of magnetic materials based on transition metals” przedstawiona przez pana magistra inżyniera Justynę Snarskiego-Adamskiego **zawiera wszystkie istotne elementy i spełnia wymogi oczekiwane od rozpraw doktorskich określone w odpowiednich obowiązujących przepisach** (Ustawa PSWiN – art. 187 oraz Uchwała IFMPAN – par. 5) jak i zwyczajowe kryteria stawiane rozprawom doktorskim. **W związku z powyższym wnioskuję o dopuszczenie mgr. inż. Justyny Snarskiego-Adamskiego do dalszych etapów w sprawie nadania stopnia doktora w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne.**

/podpisał: dr hab. Konrad J. Kapcia, prof. UAM/

dr hab. Konrad J. Kapcia, prof. UAM

*profesor uczelni, kierownik zakładu*  
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu  
Wydział Fizyki i Astronomii  
Instytut Spintroniki i Informatyki Kwantowej  
Zakład Teorii Materii Skondensowanej