

Załącznik nr 3

Wykaz osiągnięć naukowych albo artystycznych, stanowiących znaczny wkład w rozwój określonej dyscypliny

I. WYKAZ OSIĄGNIĘĆ NAUKOWYCH ALBO ARTYSTYCZNYCH, O KTÓRYCH MOWA W ART. 219 UST. 1. PKT 2 USTAWY

1. Monografia naukowa, zgodnie z art. 219 ust. 1. pkt 2a ustawy; lub
2. Cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych, zgodnie z art. 219 ust. 1. pkt 2b ustawy

- 1) **J.S. Wróbel**, D. Nguyen-Manh, M.Yu. Lavrentiev, M. Muzyk. S. L. Dudarev: “*Phase stability of ternary fcc and bcc Fe-Cr-Ni alloys*”, Physical Review B 91, 024108 (2015). (IF₂₀₁₅ = 3,736; Liczba cytowań = 93)

Mój udział w pracy polegał na stworzeniu modeli rozwinięcia klastrowego (CE – z ang. Cluster Expansion) dla układów regularnych ściennie centrowanych (fcc – z ang. face-centred cubic) i regularnych przestrzennie centrowanych (bcc – z ang. body-centred cubic) Fe-Cr-Ni, wymagających przeprowadzenia serii obliczeń przy użyciu teorii funkcjonału gęstości (DFT – z ang. density functional theory). Byłem odpowiedzialny za przeprowadzenie symulacji Monte Carlo (MC), umożliwiających zbadanie stabilności fazowej stopów w podwyższonych temperaturach, jak również za analizę i dyskusję otrzymanych wyników. Do moich zadań należało stworzenie rysunków obrazujących analizowane zjawiska oraz napisanie większości publikacji. Mój udział w pracy szacuję na 50%.

- 2) I. Toda-Caraballo, **J.S. Wróbel**, S.L. Dudarev, D. Nguyen-Manh, P.E.J. Rivera-Díaz-del-Castillo: “*Interatomic spacing distribution in multicomponent alloys*”, Acta Materialia 97, 156 (2015). (IF₂₀₁₅ = 5,058; Liczba cytowań = 65)

Mój udział w pracy polegał zarówno na przeprowadzeniu serii obliczeń DFT, stworzeniu modelu CE dla układu bcc W-Ta-V-Mo-Nb, przeprowadzeniu symulacji MC, stworzeniu odpowiednich rysunków jak również na analizie i dyskusji otrzymanych wyników. Byłem odpowiedzialny za napisanie kilku rozdziałów oraz uczestniczyłem w redagowaniu całości artykułu. Mój udział w pracy szacuję na 25%.

- 3) **J.S. Wróbel**, D. Nguyen-Manh, S.L. Dudarev, K.J. Kurzydłowski: “*Point defect properties of ternary fcc Fe-Cr-Ni alloys*”, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B 393, 126 (2017). (IF₂₀₁₇ = 1,323; Liczba cytowań = 4)

Mój udział w publikacji polegał na przeprowadzeniu obliczeń DFT dla defektów w strukturach stopów fcc Fe-Cr-Ni, analizie i dyskusji wyników. Byłem również osobą odpowiedzialną za stworzenie rysunków oraz napisanie pracy. Mój udział w pracy szacuję na 55%.

- 4) **J.S. Wróbel**, D. Nguyen-Manh, K.J. Kurzydłowski, S.L. Dudarev: “*A first-principles model for anomalous segregation in ternary tungsten-rhenium-vacancy alloys*”, *Journal of Physics: Condensed Matter* 29, 145403 (2017). (IF₂₀₁₇ = 2,617; Liczba cytowań = 42)

Byłem pomysłodawcą zastosowania modelu CE z wakansami, traktowanymi jako osobny, trzeci rodzaj „pierwiastka”, w celu zrozumienia powstawania wydzielen o zwiększonej zawartości Re w stopach W-Re poddanych napromieniowaniu. Był to pierwszy tego typu model, opisany w literaturze, umożliwiający badanie wpływu zwiększonego stężenia wakansów na stabilność fazową stopów do zastosowań w reaktorach syntezy termojądrowej. Odpowiedzialny byłem za obliczenia DFT, stworzenie modelu W-Re-wakanse, stworzenie rysunków oraz analizę i dyskusję wyników. Razem z prof. Duc’em Nguyen-Manh’em byłem również odpowiedzialny za napisanie pracy. Mój udział w pracy oceniam na 50%.

- 5) A. Fernández-Caballero, **J.S. Wróbel**, P.M. Mummery, D. Nguyen-Manh: “*Short-range order in high entropy alloys: theoretical formulation and application to Mo-Nb-Ta-V-W system*”, *Journal of Phase Equilibria and Diffusion* 38, 391 (2017). (IF₂₀₁₇ = 1,315; Liczba cytowań = 54)

Mój udział w pracy polegał na przeprowadzeniu serii obliczeń DFT, stworzeniu modelu CE dla układu bcc W-Ta-V-Mo-Nb oraz przeprowadzeniu symulacji MC. Brałem również udział w stworzeniu procedury umożliwiającej wyznaczenie parametrów uporządkowania bliskiego zasięgu dla stopów 5-składnikowych na podstawie symulacji MC oraz w analizie i dyskusji wyników. Mój udział w pracy szacuję na 25%.

- 6) Z. Leong, **J.S. Wróbel**, S.L. Dudarev, R. Goodall, I. Todd, D. Nguyen-Manh: “*The effect of electronic structure on the phases present in high entropy alloys*”, *Scientific Reports* 7, 39803 (2017). (IF₂₀₁₇ = 4,122; Liczba cytowań = 42)

Mój udział w pracy polegał na stworzeniu modelu Stonera, który umożliwił wyznaczenie stężeń stopów o wysokiej entropii dla których możliwa jest obserwacja. Odpowiedzialny byłem za obliczenia *ab initio* rozkładu gęstości elektronowej dla serii stopów o wysokiej entropii, niezbędnych do stworzenia modelu, jak również za analizę i dyskusję wyników teoretycznych oraz napisanie rozdziałów związanych z modelowaniem. Mój udział w pracy oceniam na 25%.

- 7) O. El-Atwani, N. Li, M. Li, A. Devaraj, J. K. S. Baldwin, M. M. Schneider, D. Sobieraj, **J. S. Wróbel**, D. Nguyen-Manh, S. A. Maloy, E. Martinez: “*Outstanding radiation resistance of tungsten-based high-entropy alloys*”, *Science Advances* 5, eaav2002 (2019). (IF₂₀₁₉ = 13,116; Liczba cytowań = 176)

Razem doktorantem Damianem Sobierajem oraz prof. Duc’em Nguyen-Manh’em byłem współodpowiedzialny za stworzenie modelu CE dla stopów z układu Cr-Ta-V-W, który umożliwił wytłumaczenie występowania wydzielen o zwiększonej zawartości Cr i V, obserwowanych eksperymentalnie w stopie Cr-Ta-V-W poddanemu naświetlaniu jonami. Brałem udział przy dyskusji wyników teoretycznych i eksperymentalnych oraz przy pisaniu rozdziałów związanych z modelowaniem. Byłem również kierownikiem projektu, z którego finansowane były prace związane z modelowaniem tych stopów. Mój udział w pracy oceniam na 9%.

- 8) D. Sobieraj, **J.S. Wróbel***, T. Rygier, K.J. Kurzydłowski, O. El Atwani, A. Devaraj, E. Martinez Saez, D. Nguyen-Manh: „*Chemical short-range order in derivative Cr-Ta-Ti-V-W high entropy alloys from the first-principles thermodynamic study*”, *Physical Chemistry Chemical Physics* 22, 23929 (2020). (IF₂₀₂₀ = 3,430; Liczba cytowań = 22)

Byłem pomysłodawcą badania przy użyciu połączenia metod DFT, CE i symulacji MC dla stopów o wysokiej entropii z układu Cr-Ta-Ti-V-W, jako potencjalnych materiałów do zastosowania w reaktorach syntezy termojądrowej. Byłem również kierownikiem projektu, z którego prace były finansowane. Razem z doktorantem Damianem Sobierajem oraz prof. Duc'em Nguyen-Manh'em byłem współodpowiedzialny za stworzenie modelu CE dla stopów z układu Cr-Ta-Ti-V-W, który umożliwił badanie stabilności fazowej stopów w funkcji stężenia poszczególnych pierwiastków oraz temperatury. Brałem udział przy analizie i dyskusji wyników jak również przy pisaniu artykułu. Mój udział w pracy oceniam na 30%.

- 9) M. Fedorov, **J.S. Wróbel***, A. Fernández-Caballero, K.J. Kurzydłowski, D. Nguyen-Manh: „*Phase stability and magnetic properties in fcc Fe-Cr-Mn-Ni alloys from first-principles*”, *Physical Review B* 101, 174416 (2020). (IF₂₀₂₀ = 3,575; Liczba cytowań = 19)

Byłem pomysłodawcą badania przy użyciu połączenia metod DFT, CE i symulacji MC stopów o wysokiej entropii z układu Fe-Cr-Mn-Ni, jako potencjalnych materiałów do zastosowania w reaktorach syntezy termojądrowej. Byłem również kierownikiem projektu, z którego prace były finansowane. Razem z doktorantem Markiem Fedorov'em oraz prof. Duc Nguyen-Manh'em byłem współodpowiedzialny za stworzenie modelu CE dla stopów z układu Fe-Cr-Mn-Ni, który umożliwił badanie stabilności fazowej stopów w funkcji stężenia poszczególnych pierwiastków oraz temperatury. Brałem udział przy analizie i dyskusji wyników jak również przy pisaniu artykułu. Mój udział w pracy oceniam na 30%.

- 10) D. Nguyen-Manh, **J.S. Wróbel**, M. Klimenkov, M.J. Lloyd, L. Messina, S.L. Dudarev: „*First-principles model for voids decorated by transmutation solutes: Short-range order effects and application to neutron irradiated tungsten*”, *Physical Review Materials* 5, 065401 (2021). (IF₂₀₂₁ = 3,337; Liczba cytowań = 4)

Razem z prof. Duc'em Nguyen-Manh'em byłem odpowiedzialny za stworzenie modelu CE dla stopów z układu W-Re-Os-wakanse, który umożliwił zrozumienie powstawania wydzielen o zwiększonej zawartości Re i Os w stopach W-Re-Os poddanych napromieniowaniu. Byłem odpowiedzialny za stworzenie rysunków oraz analizę i dyskusję wyników związanych z modelowaniem. Mój udział w pracy oceniam na 30%.

- 11) **J.S. Wróbel***, M.R. Zemła, D. Nguyen-Manh, P. Olsson, L. Messina, Ch. Domain, T. Wejrzanowski, S.L. Dudarev; „*Elastic dipole tensors and relaxation volumes of point defects in concentrated random magnetic Fe-Cr alloys*”, *Computational Materials Science* 194, 110435 (2021). (IF₂₀₂₁ = 2,863; Liczba cytowań = 14)

Jako kierownik zadania w projekcie EUROfusion, byłem odpowiedzialny za wykonanie części obliczeń *ab initio* oraz za analizę i dyskusję wyników związanych z właściwościami defektów punktowych w stopach Fe-Cr. Byłem odpowiedzialny również za napisanie artykułu. Mój udział w pracy oceniam na 50%.

*** corresponding author**

3. Wykaz zrealizowanych oryginalnych osiągnięć projektowych, konstrukcyjnych, technologicznych lub artystycznych, zgodnie z art. 219 ust. 1. pkt 2c ustawy.

II. WYKAZ AKTYWNOŚCI NAUKOWEJ ALBO ARTYSTYCZNEJ

1. Wykaz opublikowanych monografii naukowych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.1).
2. Wykaz opublikowanych rozdziałów w monografiach naukowych.

Rozdział w monografii naukowej przed uzyskaniem stopnia doktora:

- 1) L.G. Hector, **J.S. Wróbel**, K.J. Kurzydłowski: “*Thermodynamic and elastic properties of La-X (X=Al, Mg) intermetallic compounds from first principles calculations*”, **rozdział w książce** MAGNESIUM TECHNOLOGY 2010, Seattle, Wiley-TMS 2010: 44.

Rozdział w monografii naukowej po uzyskaniu stopnia doktora:

- 1) **J.S. Wróbel***, D. Nguyen-Manh, K.J. Kurzydłowski, “*Ab Initio Based Modelling of Diffusion and Phase Stability of Alloys*”, **rozdział w książce** Diffusion Foundations Vol. 12 "Multiscale Modelling of Diffusion-Controlled Phenomena in Condensed Matter", Switzerland, Trans Tech Publications 2017: 1-22
3. Wykaz członkostwa w redakcjach naukowych monografii.
4. Wykaz opublikowanych artykułów w czasopismach naukowych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.2).

Publikacje stanowiące dorobek naukowy (poza cyklem publikacji wymienionych w rozdziale 1.1) przed uzyskaniem stopnia doktora:

- 1) **J.S. Wróbel**, J. Piechota: “*Structural properties of ZnO polymorphs*”, Physica Status Solidi B 244, 1538 (2007); **J. Wróbel**, J. Piechota, “*Erratum: Structural properties of ZnO polymorphs*”, Physica Status Solidi B 244, 4688 (2007) (IF = 1,071; Liczba cytowań = 17)
- 2) **J.S. Wróbel**, J. Piechota: “*On the structural stability of ZnO phases*”, Solid State Communications 146, 324 (2008). (IF = 1,557; Liczba cytowań = 32)

- 3) **J.S. Wróbel**, K.J. Kurzydłowski, K. Hummer, G. Kresse, J. Piechota: “*Calculations of ZnO properties using the Heyd-Scuseria-Ernzerhof screened hybrid density functional*”, Physical Review B 80, 15 (155124) (2009). (IF = 3,475; Liczba cytowań = 92)
- 4) R. Abdank-Kozubski, M. Kozłowski, **J.S. Wróbel**, T. Wejrzanowski, K.J. Kurzydłowski, C. Goyhenex, V. Pierron-Bohnes, M. Rennhofer, S. Malinove: “*Atomic ordering in nano-layered FePt: Multiscale Monte Carlo simulation*”, Computational Materials Science 49, S80 (2010). (IF = 1,460; Liczba cytowań = 2)
- 5) L.G. Hector, **J.S. Wróbel**, K.J. Kurzydłowski: “*Thermodynamic and elastic properties of La-X (X=Al, Mg) intermetallic compounds from first principles calculations*”, **rozdział w książce** MAGNESIUM TECHNOLOGY 2010, Seattle, Wiley-TMS 2010: 44.
- 6) **J.S. Wróbel**, L.G. Hector, W. Wolf, K.J. Kurzydłowski: “*Thermodynamic and Elastic Properties of the Phases Appearing in the Lightweight La-Mg Alloys*”, Materials Science Forum 690, 15 (2011). (IF = 0; Liczba cytowań = 0)
- 7) **J.S. Wróbel**, L.G. Hector, W. Wolf, S.L. Shang, Z.K. Liu, K.J. Kurzydłowski: “*Thermodynamic and mechanical properties of lanthanum–magnesium phases from density functional theory*”, Journal of Alloys and Compounds 512, 296 (2012). (IF = 2,390; Liczba cytowań = 57)
- 8) **J.S. Wróbel**, T. Wejrzanowski, K.J. Kurzydłowski, M. Kozłowski, R. Kozubski: “*Mesoscale simulations of atomic ordering in nano-layered FePt*”, Computational Materials Science 55, 60 (2012), (IF = 1,878; Liczba cytowań = 0)

Publikacje stanowiące dorobek naukowy (poza cyklem publikacji wymienionych w rozdziale 1.1) po uzyskaniu stopnia doktora:

- 1) M. Muzyk, D. Nguyen-Manh, **J.S. Wróbel**, K.J. Kurzydłowski, N.L. Baluc, S.L. Dudarev: “*First-principles model for phase stability, radiation defects and elastic properties of W-Ta and W-V alloys*”, Journal of Nuclear Materials 442, S680 (2013). (IF = 2,016; Liczba cytowań = 22)
- 2) M. Kryński, W. Wróbel, J.R. Dygas, **J.S. Wróbel**, M. Malys, P. Śpiewak, K.J. Kurzydłowski, F. Krok, I. Abrahams: “*Ab initio molecular dynamics simulation of δ -Bi₃YO₆*”, Solid State Ionics 245-246, 43 (2013). (IF = 2,112; Liczba cytowań = 7)
- 3) M.Yu. Lavrentiev, **J.S. Wróbel**, D. Nguyen-Manh, S. L. Dudarev: “*Magnetic and Thermodynamic properties of face-centered cubic Fe-Ni alloys*”, Physical Chemistry Chemical Physics 16, 16049 (2014). (IF = 4,493; Liczba cytowań = 47)
- 4) M.Yu. Lavrentiev, **J.S. Wróbel**, D. Nguyen-Manh, S.L. Dudarev, M.G. Ganchenkova: “*Magnetic cluster expansion model for random and ordered magnetic face-centered*

- cubic Fe-Ni-Cr alloys*”, Journal of Applied Physics 120, 043902 (2016). (IF = 2,068; Liczba cytowań = 16)
- 5) M.R. Zemła, **J.S. Wróbel**, T. Wejrzanowski, D. Nguyen-Manh, K.J. Kurzydłowski: “*The helium effect at grain boundaries in Fe-Cr alloys: A first-principles study*”, Nuclear Instruments & Methods in Physics Research. Section B 393, 118 (2017). (IF = 1,323; Liczba cytowań = 2)
- 6) I. Toda-Caraballo, **J.S. Wróbel**, D. Nguyen-Manh, P. Pérez, P. E. J. Rivera-Díaz-del-Castillo: “*Simulation and Modeling in High Entropy Alloys*”, JOM 69, 2137 (2017). (IF = 2,145; Liczba cytowań = 19)
- 7) Pui-Wai Ma, S. L. Dudarev, **J.S. Wróbel**: “*Dynamic simulation of structural phase transitions in magnetic iron*”, Physical Review B 96, 094418 (2017). (IF = 3,736; Liczba cytowań = 33)
- 8) M. Calvo-Dahlborg, J. Cornide, J. Tobola, D. Nguyen-Manh, **J.S. Wróbel**, J Juraszek, S. Jouen, U. Dahlborg: “*Interplay of electronic, structural and magnetic properties as the driving feature of high entropy CoCrFeNiPd alloys*”, Journal of Physics D: Applied Physics 50, 185002 (2017). (IF = 2,373; Liczba cytowań = 14)
- 9) **J.S. Wróbel***, D. Nguyen-Manh, K.J. Kurzydłowski, “*Ab Initio Based Modelling of Diffusion and Phase Stability of Alloys*” **rozdział w książce** Diffusion Foundations Vol. 12 "Multiscale Modelling of Diffusion-Controlled Phenomena in Condensed Matter", Switzerland, Trans Tech Publications 2017: 1-22
- 10) P. Kwaśniak, **J.S. Wróbel**, H. Garbacz: “*Origin of low Young modulus of multicomponent, biomedical Ti alloys – Seeking optimal elastic properties through a first principles investigation*”, Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials 88, 352 (2018). (IF = 3,485; Liczba cytowań = 8)
- 11) A. Fernández-Caballero, M. Fedorov, **J.S. Wróbel**, P.M. Mummery, D. Nguyen-Manh: “*Configurational Entropy in Multicomponent Alloys: Matrix Formulation from Ab initio Based Hamiltonian and Application to the FCC Cr-Fe-Mn-Ni System*”, Entropy 21, 68 (2019). (IF = 2,738; Liczba cytowań = 16)
- 12) A. Litnovsky, J. Schmitz, F. Klein, K. De Lannoye, S. Weckauf, A. Kreter, M. Rasinski, J.W. Coenen, C. Linsmeier, J. Gonzalez-Julian, M. Bram, I. Povstugar, T. Morgan, D. Nguyen-Manh, M. Gilbert, D. Sobieraj, **J.S. Wróbel**: “*Smart Tungsten-based Alloys for a First Wall of DEMO*”, Fusion Engineering and Design 159, 111743 (2020). (IF = 1,692; Liczba cytowań = 8)
- 13) Ł. Żrodowski, R. Wróblewski, T Choma, B. Morończyk, M. Ostrysz, M. Leonowicz, W. Łacisz, P. Błyskun, **J.S. Wróbel**, G. Cieślak, B. Wysocki, C. Żrodowski, K. Pomian: “*Novel cold crucible ultrasonic atomization powder production method for 3d printing*”, Materials 14, 2541 (2021). (IF = 2,972; Liczba cytowań = 4)

- 14) D. Sobieraj, **J.S. Wróbel**, M.R. Gilbert, A. Litnovsky, F. Klein, K.J. Kurzydłowski, D. Nguyen-Manh: “*Composition Stability and Cr-Rich Phase Formation in W-Cr-Y and W-Cr-Ti Smart Alloys*”, *Metals* 11, 743 (2021). (IF = 2,259; Liczba cytowań = 1)
- 15) A. Litnovsky, F. Klein, X. Tan, J. Ertmer, J.W. Coenen, C. Linsmeier, J. Gonzalez-Julian, M. Bram, I. Povstugar, T. Morgan, Y.M. Gasparyan, A. Suchkov, D. Bachurina, D. Nguyen-Manh, M. Gilbert, D. Sobieraj, **J.S. Wróbel**, E. Tejado, J. Matejicek, H. Zoz, H.U. Benz, P. Bittner, A. Reuban: “*Advanced Self-Passivating Alloys for an Application under Extreme Conditions*”, *Metals* 11, 1255 (2021). (IF = 2,259; Liczba cytowań = 2)
- 16) L. Tang, F.Q. Jiang, **J.S. Wróbel**, B. Liu, S. Kabra, R.X. Duan, J.H. Luan, Z.B. Jiao, M.M. Attallah, D. Nguyen-Manh, B. Cai: “*In situ neutron diffraction unravels deformation mechanisms of a strong and ductile FeCrNi medium entropy alloy*”, *Journal of Materials Science & Technology* 116, 103 (2022). (IF = 6,155; Liczba cytowań = 2)
- 17) Z. Leong, Y. Huang, **J.S. Wróbel**, J. Gao, N. Morley, R. Goodall: “*Pairwise dilatational strain as a parametric model describing potential secondary phase formation and high-angle grain misorientation in as-cast high-entropy alloys*”, *Intermetallics* 144, 107462 (2022). (IF = 3,398; Liczba cytowań = 0)
- 18) I. Toda-Caraballo, **J.S. Wróbel**, D. Nguyen-Manh: “*Generalized universal equation of states for magnetic materials: A novel formulation for an interatomic potential in Fe*”, *Physical Review Materials* 6, 043806 (2022). (IF = 3,989; Liczba cytowań = 0)
- 19) T. Sparks, D. Nguyen-Manh, P. Zheng, **J.S. Wróbel**, D. Sobieraj, M. Gorley, T. Connolley, C. Reinhard, Y. Wang, B. Cai: “*Mechanical characterisation of V-4Cr-4Ti alloy: Tensile tests under high energy synchrotron diffraction*”, *Journal of Nuclear Materials* 569, 153911 (2022). (IF = 2,936; Liczba cytowań = 0)
- 20) S. Liu, **J.S. Wróbel**, J. Llorca: “*First-principles analysis of the Al-rich corner of Al-Li-Cu phase diagram*”, *Acta Materialia* 236, 118129 (2022). (IF = 8,203; Liczba cytowań = 0)

*** corresponding author**

5. Wykaz osiągnięć projektowych, konstrukcyjnych, technologicznych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.3).
6. Wykaz publicznych realizacji dzieł artystycznych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.3).
7. Wykaz wystąpień na krajowych lub międzynarodowych konferencjach naukowych lub artystycznych, z wyszczególnieniem przedstawionych wykładów na zaproszenie i wykładów plenarnych.

Prezentacje przed uzyskaniem stopnia doktora (pierwszy autor):

- 1) Szkoła Inżynierii Materiałowej, 29 września – 2 października **2009**, Krynica, Polska
- 2) Multiscale Materials Modelling 2010, 4-8 października **2010**, Freiburg, Niemcy
- 3) 2nd International Conference on Material Modelling, 31 sierpnia – 2 września **2011**, Paryż, Francja
- 4) ICAMM 2012 & VASP workshop, 10-16 czerwca **2012**, Nantes, Francja

Plakaty przed uzyskaniem stopnia doktora (pierwszy autor):

- 1) E-MRS Fall Meeting, 4-8 września **2006**, Warszawa, Polska
- 2) 13th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods, 11-13 lutego **2007**, Trieste, Włochy
- 3) Workshop: “Theory meets Industry”, 12-14 czerwca **2007**, Vienna, Austria
- 4) 2nd Workshop on ab initio phonon calculations, 6-8 grudnia **2007**, Kraków, Polska
- 5) Multiscale Modelling of Materials, COST Action P19, 24-28 czerwca **2008**, Brno, Czechy
- 6) E-MRS Fall Meeting, 15-19 września **2008**, Warszawa, Polska
- 7) E-MRS Fall Meeting, 14-18 września **2009**, Warszawa, Polska
- 8) 2010 TMS Annual Meeting & Exhibition, 14-18 lutego **2010**, Seattle, USA
- 9) PTM 2010, 6-11 czerwca **2010**, Avignon, Francja
- 10) Psi-k Conference, 12-16 września **2010**, Berlin, Niemcy
- 11) 3rd Workshop on ab initio phonon calculations, 1-4 grudnia **2010**, Kraków, Polska
- 12) 2011 MRS Spring Meeting and Exhibition, 25-29 kwietnia **2011**, San Francisco, USA
- 13) 5th International Light Metals Technology Conference **2011**, 19-22 lipca 2011, Lüneburg, Niemcy

Prezentacje po uzyskaniu stopnia doktora (pierwszy autor):

- 1) 7th International Conference on Multiscale Materials Modelling MMM2014, 5-10 grudnia **2014**, Berkeley, USA
- 2) Condensed Matter in Paris CMD25-JMC14, 25-29 sierpień **2014**, Paryż, Francja

- 3) EUROMAT 2015, 20-24 września **2015**, Warszawa
- 4) 13th Computer Simulation of Radiation Effects in Solids (COSIRES), 19-24 czerwca **2016**, Loughborough, Anglia
- 5) MRS 2016 Fall Meeting & Exhibits, 26 listopad – 04 grudzień **2016**, Boston, USA (2 prezentacje)
- 6) EUROMAT 2017, 17-22 września **2017**, Saloniki, Grecja (2 prezentacje)
- 7) II Sympozjum obliczeniowych metod ab initio, 12-13 marca **2018**, Kraków
- 8) EUROMAT 2019, 1-5 września **2019**, Sztokholm, Szwecja (3 prezentacje)
- 9) The 15th conference of COmputer Simulation of IRadiation Effects in Solids (COSIRES), 22-26 maj **2022**, Porquerolles, Francja
- 10) 1st NOMATEN International Conference on Materials Informatics, 1-3 czerwca **2022**, Warszawa-Świerk

Wykłady na zaproszenie po uzyskaniu stopnia doktora (pierwszy autor):

- 1) Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej, Uniwersytet Jagielloński, **2016**
- 2) Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski, **2018**
- 3) CEA, University Paris-Sclay, Francja, **2019**
- 4) Forschungszentrum Jülich, Niemcy, **2019**
- 5) Narodowe Centrum Badań Jądrowych, **2020**

Prezentacje po uzyskaniu stopnia doktora (współautor):

- 1) EUROMAT 2017, 17-22 września **2017**, Saloniki, Grecja
- 2) 13th Computer Simulation of Radiation Effects in Solids (COSIRES), 19-24 czerwca **2016**, Loughborough, Anglia
- 3) Condensed Matter in Paris CMD25-JMC14, 25-29 sierpień **2014**, Paryż, Francja
- 4) II Sympozjum obliczeniowych metod ab initio, 12-13 marca **2018**, Kraków
- 6) XX Sesja Sprawozdawcza Użytkowników ICM, 15-16 marca **2018**, Warszawa
- 7) EMRS Fall Meeting 2018, 17-20 września **2018**, Warszawa
- 8) EMRS Fall Meeting 2019, 16-19 września **2019**, Warszawa

- 9) TMS 2022 Annual Meeting & Exhibition, 27 lutego – 3 marca **2022**, online
- 10) The 15th conference of COmputer Simulation of IRradiation Effects in Solids (COSIRES), 22-26 maj **2022**, Porquerolles, Francja

Plakaty po uzyskaniu stopnia doktora (pierwszy autor):

- 1) 2nd Interdisciplinary FNP Conference, 20 listopada **2017**, Warszawa
- 2) 13th Computer Simulation of Radiation Effects in Solids (COSIRES), 19-24 czerwca **2016**, Loughborough, Anglia
- 3) EUROMAT 2015, 20-24 września **2015**, Warszawa

Plakaty po uzyskaniu stopnia doktora (współautor):

- 1) EUROMAT 2017, 17-22 września **2017**, Saloniki, Grecja (2 plakaty)
- 2) MRS 2016 Fall Meeting & Exhibits, 26 listopad – 04 grudzień **2016**, Boston, USA
- 3) II Sympozjum obliczeniowych metod ab initio, 12-13 marca **2018**, Kraków (2 plakaty)
- 4) Ab initio description of iron and steel (ADIS2018): Thermodynamics, Kinetics and Defects, 04-09 listopada **2018**, Tegernsee, Niemcy (2 plakaty)
- 5) The 15th conference of COmputer Simulation of IRradiation Effects in Solids (COSIRES), 22-26 maj **2022**, Porquerolles, Francja
- 6) Psi-k conference 2022, 22-25 sierpnia **2022**, Lausanne, Szwajcaria

8. Wykaz udziału w komitetach organizacyjnych i naukowych konferencji krajowych lub międzynarodowych, z podaniem pełnionej funkcji.
9. Wykaz uczestnictwa w pracach zespołów badawczych realizujących projekty finansowane w drodze konkursów krajowych lub zagranicznych, z podziałem na projekty zrealizowane i będące w toku realizacji, oraz z uwzględnieniem informacji o pełnionej funkcji w ramach prac zespołów.

Projekty badawcze zrealizowane (po uzyskaniu stopnia doktora):

- 1) Grant wewnętrzny Politechniki Warszawskiej w ramach programu Inicjatywa Doskonałości Uczelnia Badawcza (POB IDUB) pt. „Modelowanie ab initio stabilności fazowej stopów o wysokiej entropii RSC i RPC z układu Fe-Cr-Mn-Ni wraz z eksperymentalną weryfikacją modelu”, finansowanego przez Politechnikę Warszawską

w ramach konkursu Technologie Materiałowe-1 w ramach projektu Inicjatywa Doskonałości Uczelnia Badawcza (**kierownik projektu 2021-2022**)

- 2) Homing/2016-1/12 pt. „Ab initio modelling of phase stability and properties of high-entropy alloys” finansowany przez Fundację na rzecz Nauki w ramach programu Homing i współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego (**kierownik projektu 2017-2019**)
- 3) EUROfusion: Grant agreement no 633053 finansowany przez EUROfusion (**kierownik zadań w latach 2017-2022**)
- 4) Accelerated Metallurgy (NMP4-LA-2011-263206) finansowany przez Komisję Europejską w ramach 7-go Programu Ramowego (**wykonawca**)
- 5) 2012/05/E/ST8/03104 pt. “Ab initio modeling of electron, structural and thermodynamic properties of point defects and dopants in the semiconductor materials of group IV” finansowany przez Narodowe Centrum Nauki (**wykonawca**)
- 6) HEATPACK pt. “New generation of high thermal efficiency components packages for space” finansowany przez Komisję Europejską w ramach programu H2020 (**wykonawca**)

Projekty badawcze będące w toku realizacji:

- 1) INNUMAT „Innovative Structural Materials for Fission and Fusion”, finansowanego przez Unię Europejską w ramach konkursu HORIZON-EURATOM-2021-NRT-01 (**kierownik projektu na PW od września 2022**)
- 2) SONATA-15 pt. „Ewolucja mikrostruktury w stopach o wysokiej entropii Ta-Ti-V-W: od symulacji ab initio do technologii druku 3D”, finansowanego przez Narodowe Centrum Nauki (**kierownik projektu 2021-2023**)
- 3) EUROfusion: Grant agreement no 633053 finansowany przez EUROfusion (**kierownik zadania w 2022**)

Granty obliczeniowe zrealizowane (kierownik projektu):

- 1) Projekt “Development of machine learning potential for Ta-Ti-V-W high-entropy alloys” w ramach europejskiego konkursu PRACE (Partnership for Advance Computing in Europe) (2021)
- 2) Projekty “The investigation of properties of interstitials in concentrated Fe-Cr alloys using first principles” (2018) oraz “The investigation of an effect of C and N on radiation-induced clustering in Fe-Cr alloys” (2021) w ramach europejskich konkursów EUROfusion HPC Marconi

- 3) Projekt "Obliczenia ab-initio dla stopów Fe-Cr-Ni do zastosowań w reaktorach termofuzyjnych" w ramach konkursu Poznańskiego Centrum Superkomputerowo-Sieciowego (2016-2021)

Granty obliczeniowe w toku realizacji (kierownik projektu):

- 1) „Modelowanie stabilności fazowej i właściwości stopów o wysokiej entropii ” (2017-2022) w ramach konkursów ICM UW
- 2) Projekt "The investigation of the effect of stress and strain on radiation defects in alloys" (2022) w ramach europejskiego konkursu EUROfusion HPC Marconi

10. Wykaz członkostwa w międzynarodowych lub krajowych organizacjach i towarzystwach naukowych wraz z informacją o pełnionych funkcjach.
11. Wykaz staży w instytucjach naukowych lub artystycznych, w tym zagranicznych, z podaniem miejsca, terminu, czasu trwania stażu i jego charakteru.

Staż naukowe przed uzyskaniem stopnia doktora:

- 1) 03.2008: 3-tygodniowy staż w grupie prof. Gerog'a Kresse'go na Uniwersytecie Wiedeńskim w **Austrii**

Staż naukowe po uzyskaniu stopnia doktora:

- 1) 03.2022-04.2022: 3-tygodniowy wyjazd naukowy w Service de Recherches de Métallurgie Physique w CEA, Université Paris-Saclay we **Francji**
- 2) 11.2019: 2-tygodniowy wyjazd naukowy w Service de Recherches de Métallurgie Physique w CEA, Université Paris-Saclay we **Francji**
- 3) 01.2013 – 06.2015: staż podoktorski (post-doc) w grupie prof. Sergei'a Dudarev'a Modelowania Materiałów w Culham Centre for Fusion Energy w **Wielkiej Brytanii**
- 4) 01.2013 – 06.2015: cotygodniowe spotkania jednodniowe, jako członek Materials for Fusion and Fission Power Group na Uniwersytecie Oksfordzkim w **Wielkiej Brytanii**

12. Wykaz członkostwa w komitetach redakcyjnych i radach naukowych czasopism wraz z informacją o pełnionych funkcjach (np. redaktora naczelnego, przewodniczącego rady naukowej, itp.).

- **Redaktor gościnny** (guest editor) specjalnego wydania czasopisma *Metals* pt. *Prediction of Phase Stability and Mechanical Properties of Novel Alloys*

13. Wykaz recenzowanych prac naukowych lub artystycznych, w szczególności publikowanych w czasopismach międzynarodowych.

Zgodnie z bazą Web of Science byłem recenzentem **54 recenzji**, najczęściej w czasopismach Journal of Alloys and Compounds (13), Acta Materialia (7), Computational Materials Science (6), Journal of Nuclear Materials (4), Journal of Phase Equilibria and Diffusion (3), Materials Science and Engineering B (3), Fusion Engineering and Design (2), Metals (2).

14. Wykaz uczestnictwa w programach europejskich lub innych programach międzynarodowych.

15. Wykaz udziału w zespołach badawczych, realizujących projekty inne niż określone w pkt. II.9.

16. Wykaz uczestnictwa w zespołach oceniających wnioski o finansowanie badań, wnioski o przyznanie nagród naukowych, wnioski w innych konkursach mających charakter naukowy lub dydaktyczny.

Byłem recenzentem 3 projektów: jednego w konkursie PRELUDIUM NCN (**Polska**), jednego w konkursie Czech Science Foundation (**Czechy**) i jednego w konkursie Dutch Research Council (**Holandia**).

Należałem również do jury podczas obrony doktoratu Océane Buggenhoudt na Université Paris-Saclay we **Francji**.

III. WSPÓLPRA Z OTOCZENIEM SPOŁECZNYM I GOSPODARCZYM

1. Wykaz dorobku technologicznego.
2. Współpraca z sektorem gospodarczym.

Prywatne firmy były partnerami w projektach Accelerated Metallurgy (m.in. Airbus, Rolls-Roys, Avio, Fiat) oraz INNUMAT (m.in. Électricité de France, Ansaldo Nucleare, Framatome), w których brałem udział. Firmy Pratt&Witney Polska i Materials Engineering Group wsparły listem intencyjnym projekt HOMING.

3. Wykaz uzyskanych praw własności przemysłowej, w tym uzyskanych patentów krajowych lub międzynarodowych.
4. Wykaz wdrożonych technologii.
5. Wykaz wykonanych ekspertyz lub innych opracowań wykonanych na zamówienie instytucji publicznych lub przedsiębiorców.

Wykonywałem badania na zamówienie dla przedsiębiorstw: Boeing Company oraz IMRA Inc.

6. Wykaz udziału w zespołach eksperckich lub konkursowych.
7. Wykaz projektów artystycznych realizowanych ze środowiskami pozaartystycznymi.

IV. DANE NAUKOMETRYCZNE

1. Impact Factor (w dziedzinach i dyscyplinach, w których parametr ten jest powszechnie używany, jako wskaźnik naukometryczny).
120,377 (na podstawie Baza Wiedzy PW)
2. Liczba cytowań publikacji wnioskodawcy, z oddzielnym uwzględnieniem autocytowań.
939 cytowań, w tym 847 bez autocytowań (wg. bazy Web of Science, stan na 29.09.2022)
3. Indeks Hirscha.
16 (wg. bazy Web of Science, stan na 29.09.2022)

Informacje zawarte w pkt. IV powinny wskazywać również na bazę danych, na podstawie której zostały podane.

Przy wyborze tej bazy należy zwracać uwagę na specyfikę dziedziny i dyscypliny naukowej, w której kandydat ubiega się o nadanie stopnia doktora habilitowanego.

Rada Doskonałości Naukowej informuje, że podawanie danych naukometrycznych – w opinii Rady Doskonałości Naukowej – jest wskazane i zalecane, wynika to także ze stosowanej powszechnie praktyki przez samych kandydatów ubiegających się o awans naukowy. Należy jednak podkreślić, że podane we wnioskach o wszczęcie postępowania awansowego dane naukometryczne nie mogą stanowić kryterium oceny dorobku naukowego Kandydata dla podmiotów doktoryzujących, habilitujących oraz samej Rady Doskonałości Naukowej, organów prowadzących postępowania w sprawie nadania stopnia lub tytułu. Zadaniem tych

organów jest przede wszystkim ocena ekspercka dorobku naukowego Kandydata ubiegającego się o awans naukowy, zaś decyzja o nadaniu stopnia lub tytułu nie powinna być uzależniona od podania tych danych.

.....

(podpis wnioskodawcy)