



Mens agitat molem

**Katedra Fizyki Teoretycznej IF UMCS**  
**Condensed Matter Theory Group**

ul. Radziszewskiego 10  
20 031 Lublin, POLAND

<http://kft.umcs.lublin.pl/ztfs> fax: (+48 (0)81) 537 61 90

---

**Prof. dr hab. Karol Izidor Wysokiński** tel. (081)5376236  
e.mail: [karol.wysokinski@poczta.umcs.lublin.pl](mailto:karol.wysokinski@poczta.umcs.lublin.pl)

---

Lublin 18 lutego 2024 r.

Opinia na temat  
osiągnięcia naukowego p.t. „**Poszukiwanie struktur niskowymiarowych o optymalnych  
własnościach termoelektrycznych**”  
oraz ocena dorobku, naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego  
**dr. inż. Krzysztofa Piotra Zbereckiego**  
w związku z postępowaniem o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego.

Dr inż. Krzysztof Piotr Zberecki urodzony 22 stycznia 1977 roku ukończył studia fizyczne na Wydziale Fizyki Politechniki Warszawskiej, gdzie w roku 2002 uzyskał tytuł magistra inżyniera nauk fizycznych na podstawie pracy „*Korelacje cząstek nieidentycznych w eksperymencie STAR*”, przygotowanej pod kierunkiem prof. dr hab. Jana Pluty. Stopień naukowy doktora nauk fizycznych nadała mu ta sama Rada 11 października 2007 roku na podstawie pracy „*Korelacje oktapolowe w jądrach atomowych*”. Promotorem w przewodzie był prof. dr hab. inż. Piotr Magierski. W 2010 roku ukończył Studia Podyplomowe „*Zarządzanie projektami*” na SGH. Od 15 lutego 2008 roku dr Zberecki został zatrudniony na Wydziale Fizyki Politechniki Warszawskiej na stanowisku adiunkta naukowo-badawczego i pracuje tam do chwili obecnej zajmując to samo stanowisko.

Postępowanie habilitacyjne przebiega zgodnie z ustawą z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2021 r. poz. 478 zm.). Art. 219. 1. tej Ustawy stwierdza, że „Stopień doktora habilitowanego nadaje się osobie, która posiada stopień doktora” i m.in. posiada „1 cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych opublikowanych w czasopiśmie naukowych lub w recenzowanych materiałach z konferencji międzynarodowych” oraz „wykazuje się istotną aktywnością naukową albo artystyczną realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury, w szczególności zagranicznej”.

Rozpocznę od tego drugiego wymogu ustawowego, czyli realizacji badań w więcej niż jednej instytucji. W dokumentacji znajduję informację, że Habilitant przez cztery miesiące przebywał na stażu zagranicznym. Pełna dostępna informacja na temat odbytego stażu to dwa zdania stwierdzające: „*Po doktoracie odbyłem czteromiesięczny staż w Instytucie Elektroniki, Mikroelektroniki i Nanotechnologii (IEMN) w Lille, Francja (1.09.2008-20.12.2008), gdzie zajmowałem się modelowaniem kwantowych laserów kaskadowych za pomocą metod Monte Carlo. Otrzymane wyniki posłużyły do przygotowania studium wykonalności części symulacyjnej projektu badawczego zamawianego „Zaawansowane technologie dla półprzewodnikowej optoelektroniki podczerwieni”, którego byłem wykonawcą.*” Należy stwierdzić, że formalnie rzecz biorąc wymóg Ustawy został spełniony, choć w minimalnym tylko stopniu. Jeśli

dobrze rozumiem to wynikiem stażu nie były żadne publikacje. Kierownikiem wspomnianego grantu zamawianego był prof. dr hab. Maciej Bugajski z ITE w Warszawie. Dodam w tym miejscu, że dr Zberecki uczestniczył też w realizacji grantu finansowanego przez NCN a kierowanego przez prof. Józefa Barnasia, współautora większości publikacji wchodzących w skład osiągnięcia habilitacyjnego.

Osiągnięcie habilitacyjne pana dr. Zbereckiego to cykl tematycznie powiązanych 13 prac oznaczonych symbolami H1 do H13 zatytułowany: „**Poszukiwanie struktur niskowymiarowych o optymalnych własnościach termoelektrycznych.**” Tytuł bardzo dobrze odzwierciedla wyniki zawarte w publikacjach. Celem wprowadzenia należy w tym momencie zauważyć, że poszukiwanie nowych materiałów do zastosowań termoelektrycznych jest od szeregu już lat bardzo ważną tematyką intensywnie rozwijaną przez liczne grupy teoretyczne i doświadczalne. Zjawisko termoelektryczne znane jest od dawna, a jego najważniejsza właściwość pozwalająca na bezpośrednią zamianę energii cieplnej na elektryczną była i jest wykorzystywana w specjalnych zastosowaniach, np. jako źródło prądu elektrycznego w autonomicznych pojazdach kosmicznych. Niestety znane materiały termoelektryczne charakteryzują się zbyt niską sprawnością, aby były ekonomicznie konkurencyjne dla tradycyjnych metod zamiany ciepła na energię elektryczną np. wykorzystujących paliwa kopalne. Zwiększenie sprawności silników, chłodziarek lub innych urządzeń termoelektrycznych jest zatem nadrzędnym celem badań, o istotnym znaczeniu dla gospodarki i środowiska. Niektóre wcześniejsze prace (głównie teoretyczne autorstwa Dresselhaus, Mahana i innych) sugerowały, że materiały niskowymiarowe i nanostruktury mogą charakteryzować się wysokimi wartościami tzw. termoelektrycznego współczynnika dobroci  $ZT$  (ang. figure of merit). Duże wartości tego parametru, który jest wprost proporcjonalny do przewodnictwa elektrycznego  $G$  materiału, temperatury pracy  $T$  i kwadratu współczynnika Seebecka  $S$  (mierzącego termosilę) a odwrotnie proporcjonalny do przewodnictwa cieplnego  $K$  przekładają się na wysoką sprawność urządzeń z niego zbudowanych. Stąd olbrzymie wysiłki badaczy i duże nakłady finansowe na poszukiwanie nowych lepszych materiałów lub złożonych struktur z różnych materiałów wykazujących korzystne właściwości termoelektryczne. Można tu wspomnieć o najnowszych pomysłach i ich doświadczalnych realizacjach poprzecznej termoelektryczności czy wykorzystania tzw. materiałów goniopolarnych (o zależnych od kierunku właściwościach termoelektrycznych: J. Heremans – *Joule* 2022).

Oceniając rozprawę habilitacyjną należy zauważyć, że po uzyskaniu stopnia doktora pan dr Zberecki zmienił tematykę badawczą z fizyki jądrowej na zagadnienia fizyki materii skondensowanej. Duża część jego aktywności naukowej w ostatnich latach to poszukiwanie struktur niskowymiarowych do zastosowań termoelektrycznych, co stanowi tematykę habilitacji. Autor badał różne dwuwymiarowe krysztaly o geometrii wstążek. Od czasu odkrycia grafenu struktury takie stanowią ważny kierunek badań. Dokładniej, dwuwymiarowe długie nanowstążki o specjalnie zaprojektowanym charakterze ich brzegów i odpowiednio modyfikowane przez domieszkowanie i/lub pasywację niewyasyconych wiązań atomów brzegowych to struktury badane w pracach wchodzących w skład cyklu stanowiącego osiągnięcie habilitacyjne.

W pracach naukowych ocenianego osiągnięcia habilitacyjnego pan dr Zberecki obliczał wspomniane współczynniki transportowe oraz współczynnik  $ZT$  nanostruktur dwuwymiarowych materiałów. Wykonując obliczenia z pierwszych zasad korzystał ze standardowych, ogólnie dostępnych kodów numerycznych takich jak SIESTA czy QUANTUM ESPRESSO. Pozwalają one na dość dobre wyznaczenie widma energetycznego elektronów. Inny kod TRANSIESTA znajduje przybliżone wartości zależnej od energii i spinu funkcji transmisji  $T(E)$  (funkcja transmisji to analog macierzy  $S$  w kwantowej teorii rozproszeń, ale

wiążąca inne stany rozproszeniowe). Te informacje z obliczeń z pierwszych zasad wystarczają, aby w ramach podejścia typu Landauera-Buttikera i przybliżenia liniowego wyznaczyć wszystkie współczynniki kinetyczne i transportowe. Jedynie uwzględnienie fononowego wkładu do przewodnictwa cieplnego wymagało dodatkowych obliczeń, które były (jak wynika z oświadczeń) wykonane przez współautora publikacji pana Wierzbickiego. Dla oszacowania tego wkładu korzysztano z kodów VASP, ABINIT i wyznaczano najpierw fononowe stałe siłowe do najbliższych sąsiadów aż do czwartego rzędu i korzystając z kolejnych kodów m.in. współautorstwa prof. Parlińskiego obliczano fononowy wkład do przewodnictwa cieplnego. W zasadzie wszystkie te obliczenia są standardowe wykorzystujące ogólnie dostępne kody. To co wymagało dobrej wiedzy to zaproponowanie geometrii i optymalizacja struktur oraz dobra interpretacja wyników obliczeń. Moja ocena tych istotnych przy obliczeniach z pierwszych zasad elementów metodyki badań wypada bardzo dobrze. Wydaje się, że Autor rozważył wszystkie najważniejsze elementy struktury pasmowej oraz uporządkowań magnetycznych badanych struktur i we właściwy sposób interpretował je w kontekście badanych właściwości termoelektrycznych.

W pracy [H1] Autor badał wstążki krzemowe o grubości jednego i szerokości 6-12 atomów krzemu w postaci kryształów dwuwymiarowych z brzegami typu zygzak. Brzegi nanowstążek były zakończone atomami wodoru, aby zneutralizować niewysyczone wiązania. Wybrano brzegi typu zygzak, gdyż wtedy pojawiają na nich zlokalizowane momenty magnetyczne z dwiema możliwymi konfiguracjami na przeciwległych brzegach: antyferromagnetyczną (stabilną) lub ferromagnetyczną (o nieznacznie wyższej energii, zatem łatwą do ustabilizowania zewnętrznym polem magnetycznym). Ta właściwość nanostruktury pozwalała na badanie transportu zarówno ładunkowego jak i spinowego. Należy dodać, że w chwili wykonywania pracy [H1] silicen (dzwuwymiarowy krzem) był mało znaną strukturą, w przeciwieństwie do dobrze znanego grafenu. Z grafenem już wcześniej wiązano wielkie nadzieje na zastosowania w urządzeniach elektronicznych i termoelektrycznych. Obliczenia widma paska silicenu wykonano korzystając z różnych przybliżeń często stosowanych w obliczeniach z pierwszych zasad, a mianowicie GGA i LDA. Uzyskano jakościową zgodność obliczonych współczynników transportu w obu przybliżeniach. Ilościowo wyniki są zgodne, ale z dokładnością do czynnika rzędu 2. Dotyczy to m.in. współczynnika Seebecka i współczynnika ZT, którego wartości liczbowe są rzędu 100 bez uwzględnienia wkładu fononów do przewodnictwa cieplnego. Mimo, że realistyczna (czyli obliczona z uwzględnieniem przewodnictwa fononowego) wartość współczynnika ZT paska silicenu nie była zbyt duża (nieco przekraczała wartość 2) to publikacja [H1] wzbudziła duże zainteresowanie badaczy i w pierwszych latach miała po kilkanaście a i ostatnio wciąż posiada po kilka cytowań rocznie. Dało to ogółem 115 cytowań (stan wg WoK na 25 marca 2024 r.). To, że nanowstążki silicenu a także innych dwuwymiarowych struktur posiadają magnetyczne uporządkowanie spinów atomów brzegowych otwiera nowe możliwości zastosowań struktur w urządzeniach spintronicznych. Dla autorów pracy [H1] taka sytuacja była okazją do analizy magnetooporu oraz spinowego zjawiska Seebecka, tj. pojawienia się spinowego napięcia w wyniku różnicy temperatur na końcach wstążki. Uzyskano duże wartości (około 0.1 meV/K) dla obu współczynników Seebecka: ładunkowego i spinowego. Nie znam prac doświadczalnych mierzących termoelektryczne właściwości silicenu. Także Habilitant nie wspomina o tym w autoreferacie. Pewnie nie jest łatwo badać ten materiał, pewnie też z powodu braku swobodnych jego warstw.

Nie będę omawiał wszystkich osiągniętych wyników szczegółowo, bo tego jest zbyt dużo i należałoby powtarzać wiele z nich w nowym kontekście z nieco innymi wartościami współczynników transportu i termoelektrycznego współczynnika dobroci. Chodzi o to, że metodyka badań i konkretne obliczenia są bardzo podobne dla różnych materiałów. Badano struktury krzemowe (silicenu), azotek boru (BN) i węgiel krzemu (SiC), polimery węglo-

we i modyfikowane nanowstążki grafenowe. Zawsze były to dwuwymiarowe paski ze specjalnie dobranymi brzegami, ewentualnie domieszkowane innymi atomami. Ograniczę się do pobieżnego wymienienia najważniejszych faktów.

Kolejne publikacje osiągnięcia habilitacyjnego podejmują badanie zjawiska termoelektrycznego dla funkcjonalizowanych nanowstążek silicenowych oraz innych struktur. W pracy [H2] były to silicenowe nanowstążki o brzegach typu zygzak domieszkowane atomami P lub Al, a w pracy [H3] szczegółowo badano wpływ pasywacji wodorem niewysyconych wiązań atomowych na brzegach paska. Kolejne prace [H4] i [H5] analizowały efekty domieszkowania atomami magnetycznymi tego samego materiału. Prace [H6] i [H7] opisują badania zjawiska termoelektrycznego w dwuwymiarowych nanostrukturach, odpowiednio z węgla krzemu (SiC) oraz azotku boru (BN). Polimery węglowe też w postaci dwuwymiarowych nanowstążek to kolejna duża grupa materiałów, które były intensywnie badane na początku XXI wieku. Okazało się, że także i takie struktury dwuwymiarowe odpowiednio zoptymalizowane posiadały niezerowy moment magnetyczny zwykle na atomach węgla i w pobliżu domieszek glinu lub azotu. Wyniki zamieszczone w pracy [H8] sugerują, że polimery węglowe mają wartości termoelektrycznego współczynnika dobroci ZT rzędu 30 dla zjawisk ładunkowych i spinowych. Jest to olbrzymia wartość tego parametru i dziwi brak szerszego zainteresowania (praca ma kilka obcych cytowań) tymi wynikami w literaturze przedmiotu. Struktury te były optymalizowane z wykorzystaniem algorytmów genetycznych. Nieco inne w porównaniu z pracą [H8] domieszkowanie i pasywację grupami NOCH<sub>3</sub> polimerów węglowych badano w pracy [H9], natomiast w pracy [H10] autorzy otrzymali wartości parametrów ZT ładunkowych i spinowych rzędu 60. Struktury węglowe o specjalnym ułożeniu V-kształtnym atomów analizowano w pracach [H11] i [H12] uzyskując wyniki podobne jak dla innych materiałów. Ostatnia jedno autorska praca zatytułowana „Silicene nanoribbons” jest rozdziałem w monografii „Silicon Nanomaterials Sourcebook” pod redakcją K. Sattlera, wydanej w 2018 roku przez CRC Press. Zawiera ona podsumowanie literaturowych i własnych wyników badań wstążek silicenowych.

Po przeczytaniu prac nasuwa się pytanie. Jaka jest naukowa wartość tej dużej liczby wyników dla różnych materiałów i funkcjonalizowanych struktur? Czy wyniki te w sposób istotny poszerzyły naszą wiedzę i przyczyniły się do rozwoju tej dziedziny? Kody numeryczne są ogólnie dostępne, a analizowanych struktur chyba faktycznie nikt nie badał pod kątem zastosowań termoelektrycznych. Obliczenia z pierwszych zasad mają największe znaczenie wtedy, gdy ułatwiają bądź pozwalają na interpretacje i zrozumienie wyników doświadczalnych. Tutaj są to jedynie wyniki teoretyczne. Najważniejsze, moim zdaniem znaczenie tych prac polega na tym, że większość badanych struktur była wcześniej wytworzona doświadczalnie, ale nie badano ich pod kątem zastosowań termoelektrycznych. Z takiego punktu widzenia jest szansa, że uzyskane wyniki w przyszłości zainteresują grupy eksperymentalne badające te struktury i materiały do rozszerzenia badań na właściwości termoelektryczne. Należy zatem odpowiedzieć na powyższe pytania, że przeprowadzone badania poszerzają naszą wiedzę o zjawiskach termoelektrycznych w dwuwymiarowych nanostrukturach krzemowych, węglowych i innych. Badania stanowią istotny wkład w rozwój dyscypliny naukowej natomiast różnorodność zagadnień naukowych podjętych przez habilitanta w ostatnich paru latach (o tym później), odbyty staż naukowy i aktualna współpraca naukowa stanowią przesłanki do stwierdzenia, że **kandydat wykazuje się istotną aktywnością naukową**. Oświadczenia współautorów dodatkowo przekonują, że to dr Zberecki odgrywał kluczową rolę w wykonaniu wszystkich omawianych wyżej publikacji.

Całkowity dorobek naukowy pana Zbereckiego według bazy Web of Knowledge to 31 publikacji naukowych, cytowanych łącznie 490 razy a bez autocytowań 457 razy. Index Hir-

scha habilitanta  $h=11$ , natomiast średnia liczba cytowań na pracę wynosi 15,81. Ta ostatnia liczba jest bardzo dobrym wynikiem, świadczącym o dużym zainteresowaniu jego pracami w literaturze naukowej. Oprócz dużej liczby cytowań prac [H1-H3] także ostatnie publikacje będące wynikiem współpracy dr Zbereckiego z grupą doświadczalną prof. M. Batzilla z Uniwersytetu Południowej Florydy są licznie cytowane. Owocna współpraca z grupą doświadczalną jest dobrym prognostykiem dla dalszej kariery habilitanta.

Prace naukowe wchodzące w zakres osiągnięcia habilitacyjnego były opublikowane w dobrych czasopismach specjalistycznych takich jak: *Physical Review* – 2 prac, *Physical Chemistry Chemical Physics* – 3, *physica status solidi B* -2, *Acta Physica Polonica A* – 2 oraz po jednej w *J. Phys.: Condensed Matter*, *J. Magnetsim and Magnetic Materials* oraz rozdział w monografii. Wygłosił on też kilka wykładów ustnych na konferencjach. W spisie osiągnięć znalazłem jedno wystąpienie z wykładem na zaproszenie, ale osobiście nie uważam tego zaproszenia na konferencję „*Global Conference on Magnetism and Magnetic Materials*” w Rzymie w 2019 roku za wielki sukces. Łączny dorobek naukowy Kandydata obejmuje 31 prac naukowych notowanych w bazie WoK. Tematyka prac nie wchodzących do habilitacji obejmuje m.in. badania zjawisk magnetycznych w nowych materiałach, zjawisk dynamicznych w nanostrukturach, pewnych zagadnień optymalizacji i poszukiwania nowych materiałów, itp. Ważne są badania chalcogenidków metali przejściowych prowadzone we współpracy z grupą doświadczalną, co już podkreślałem powyżej.

Zaangażowanie dr Zbereckiego w pozyskiwanie środków na badania z instytucji finansujących naukę jest dość skromne, ale to może być związane z dobrą kondycją finansową macierzystej Uczelni. Kieruje on dwoma grantami obliczeniowymi (od pięciu i od siedmiu lat). Jego osiągnięcia dydaktyczne oraz organizacyjne są na dobrym poziomie, typowym dla aktywnego pracownika. Był promotorem kilku prac inżynierskich i innych. Uczelni na tym etapie kariery naukowej. Trzykrotnie był laureatem Nagród Rektora Politechniki Warszawskiej za działalność naukową: dwukrotnie była to nagroda zespołowa, natomiast za lata 2019-2020 nagroda indywidualna I stopnia.

**Reasumując należy stwierdzić, że dr Zberecki spełnia wymogi ustawowe i zwyczajowe dla kandydatów do stopnia doktora habilitowanego. Przebywał na stażu naukowym zagranicznym, posiada monotematyczny cykl publikacji, które istotnie poszerzają naszą wiedzę o właściwościach termoelektrycznych dwuwymiarowych nanostruktur. Posiada inny, zróżnicowany tematycznie dorobek naukowy oraz osiągnięcia w zakresie kształcenia młodej kadry. Dlatego wnoszę do Rady Naukowej o nadanie mu stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne.**

