



Prof. dr hab. Bogdan Bułka

Instytut Fizyki Molekularnej PAN

ul. Mariana Smoluchowskiego 17, 60-179 Poznań

E-mail: bulka@ifmpan.poznan.pl; tel. 61 8695-152

Recenzja rozprawy habilitacyjnej oraz ocena dorobku naukowego dra inż. Krzysztofa Zbereckiego

Od początku swojej działalności naukowej Pan dr inż. Krzysztof Zberecki jest związany z Politechniką Warszawską. W roku 2002 ukończył On studia fizyki na Wydziale Fizyki PW i otrzymał stopień magistra inżyniera za pracę pt. „Korelacje cząstek nieidentycznych w eksperymencie STAR”, wykonaną pod kierunkiem prof. nzw. dr hab. Jana Pluty. W roku 2007 obronił rozprawę doktorską pt. „Korelacje oktupolowe w jądrach atomowych”, której promotorem był prof. dr hab. inż. Piotr Magierski. Od 15 lutego 2008 r. jest zatrudniony na stanowisku adiunkta naukowo-dydaktycznego na Wydziale Fizyki. Przez wiele lat pracował naukowo w grupie pani prof. dr hab. Renaty Świrkowicz prowadzącej badania teoretyczne transportu elektronowego w magnetycznych nanostrukturach. Znane i doceniane są ich badania efektów termoelektrycznych, w szczególności teoria spinowej termosity, która stanowiła podstawę postępowania habilitacyjnego dra M. Wierzbickiego z roku 2019.

Ocena osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę postępowania habilitacyjnego

W ciągu 15 lat po doktoracie dr inż. K. Zberecki opublikował 29 prac w renomowanych czasopismach naukowych. **Za podstawę postępowania habilitacyjnego uznał monotematyczny cykl 13 publikacji, które opatrzył tytułem:**

„Poszukiwanie struktur niskowymiarowych o optymalnych własnościach termoelektrycznych” .

Prace te zostały opublikowane w latach 2013-2018. Wśród nich jest rozdział autorstwa K. Zbereckiego w monografii „Silicon Nanomaterials Sourcebook ” wydanej przez K. Sattlera w CRC Press 2018, oraz 12 prac zbiorowych. Ustawa mówi, że habilitant winien posiadać osiągnięcia naukowe stanowiące znaczący indywidualny wkład w rozwój określonej dyscypliny naukowej. Z oświadczeń współautorów wynika, że jedynie wspomagali badania i **habilitant miał znaczący indywidualny wkład w wymienionych publikacjach.**

Badania modelowe silicenu

Silicen wytworzono po raz pierwszy w 2010 roku i niedługo potem dr inż. K. Zberecki rozpoczął badania teoretyczne tego fascynującego materiału (podobnego do popularnego grafenu). **Do rozprawy habilitacyjnej wybrał On prace H.1-H.5: dwie z nich opublikowane w Physical Review B Physical, po jednej w Chemistry Chemical Physics, Journal of Magnetism and Magnetic Materials oraz w Acta Physica Polonica A. Publikacje te cieszyły się bardzo dużym zainteresowaniem i były cytowane ponad 200 razy.**

Prace te prezentują jasny plan badawczy. W pracy H1 obszernie zbadano własności cienkich pasków silicenu (o grubości jednej warstwy atomowej i o szerokości kilku łańcuchów krzemowych: $N = 5, 6, 7$). Wyznaczono strukturę elektronową, uporządkowanie magnetyczne i charakterystyki transportu elektronowego, w szczególności własności termoelektryczne. Następnie w zbadano wpływ domieszek glinu i fosforu w pracy H2, pasywacji wodorem wiązań brzegowych – w H3, oraz rolę domieszek magnetycznych: kobaltu i żelaza – w H4 i H5. Strukturę atomową i elektronową wyznaczono numerycznie w ramach teorii funkcjonału gęstości (DFT) wykorzystując znany kod SIESTA. Do wyznaczenia charakterystyk transportowych stosowano kod TRANSIESTA, który opiera się na założeniu, że struktura elektronowa, uporządkowanie ładunkowe i spinowe wyznaczone przez kod SIESTA (dla stanu równowagowego i temperatury $T=0$) pozostają niezmiennie przy wzroście temperatury (nawet do $T=300K$) i zmianie potencjału chemicznego (nawet dla dużych wartości kiedy przechodzi on przez zlokalizowane stany elektronowe znacznie oddalone od poziomu Fermiego)]. Jest to istotne ograniczenie, o którym trzeba pamiętać przy analizie wyników badań. Należy dodać, że w ten sposób wyznaczano przepływ prądu równoległy wzdłuż paska, a nie dla konfiguracji prostopadłej (szeroko badanej w układach spintronicznych).

Ciekawym i ważnym rezultatem jest odkrycie (w pracy H1) uporządkowania ferrimagnetycznego na zygzakowych krawędziach pasków silicenu, przy tym przeciwległe krawędzie mają namagnesowanie antyrównoległe, które można obrócić do konfiguracji równoległej przykładając niewielkie pole magnetyczne. Są to kluczowe warunki dla wystąpienia gigantycznego efektu magnetooporowego (GMR), odkrytego w 1988 roku przez P. Grunberga i A. Fertę, a opisanego teoretycznie przez J. Barnasia. Badania dra inż. K. Zbereckiego koncentrują się analizie termosyły, także spinowo-zależnej termosyły, w szczególności na współczynniku dobroci termoelektrycznej (ZT), który służy do określenia wydajności elementów termoelektrycznych w generatorach prądu albo elementach chłodniczych. Pożądaną dużą wartość współczynnika dobroci termoelektrycznej otrzymano dla antyrównoległej konfiguracji namagnesowania na krawędziach pasków silicenu. Wynik ten jest związany ze półprzewodnikową strukturą elektronową, z przerwą energetyczną (o szerokości 0.4 eV), i co ważne z dużą gęstością stanów na jej brzegach. Transport elektronowy jest możliwy po odpowiedniej zmianie poziomu chemicznego. Obliczenia uwzględniały

również fononowe przewodnictwo ciepłe, które redukuje współczynnik dobroci termoelektrycznej, jednakże pozostaje on nadal duży ($ZT > 1$).

Praca H2 prezentuje badania roli niemagnetycznych domieszek, glinu i fosforu. Domieszki lokują się na krawędziach (tak jest korzystnie energetycznie) i redukują wielkość momentu magnetycznego, a ich większa koncentracja może zmieniać ustawienie namagnesowania na krawędziach na równoległe. Praca obszernie opisuje różne właściwości magnetotransportowe domieszkowanego materiału.

Rolę magnetycznej domieszki badano w pracy H4. Pokazano, że moment magnetyczny kobaltu jest zgodny z lokalnym momentem magnetycznym na atomach krzemu. Stabilna konfiguracja jest ta z antyrównoległym uporządkowaniem momentów magnetycznych na przeciwległych krawędziach, która charakteryzuje się wąską (ok. 0.15 eV) przerwą energetyczną. Wyniki te są ważne przy projektowaniu układów magnetooporowych.

Paski silicenu charakteryzują się niewysyconymi wiązaniami na brzegowych atomach krzemu, które łatwo ulegają pasywacji. W modelowaniu (w H1, H2 i H4) przyjmowano, że krawędziowe wiązania są równomiernie wysycone wodorem. Praca H3 pokazuje, że proces pasywacji można przeprowadzić na kilka sposobów, co ma wpływ na własności magnetooporowe. Na przykład dla asymetrycznej pasywacji krawędzi silicenu stabilne rozwiązanie otrzymano dla równoległego uporządkowania namagnesowania na przeciwległych krawędziach. Takie układy są interesujące dla badań spinowych efektów termoelektrycznych. Tak jak poprzednio układy te mają półprzewodnikowa strukturę pasmową i wykazują dużą wartość termosily.

Modelowanie nanopasków z węgla krzemu, azotku boru, polimerów węglowych oraz łańcuchów węglowych

Kolejne publikacje z rozprawy habilitacyjnej opisują badania teoretyczne nanopasków: z węgla krzemu (SiC) (H.6), azotku boru (BN) (H.7), polimerów węglowych (H.8-H.11), oraz łańcuchów węglowych (H.11, H.12). Ponieważ metodologia badań i prezentacji jest podobna do wcześniejszych prac, wymienię najważniejsze rezultaty wnoszące istotny wkład habilitanta do dziedziny.

Węgiel krzemu i azotek boru to atrakcyjne materiały, cieszące się dużym zainteresowaniem, które otrzymano zupełnie niedawno (SiC) w 2021 r. oraz (BN) w 2009r. Ich struktura jest podobna do grafenu i silicenu, dlatego potencjalnie mogą znaleźć zastosowania w nanoelektronice. Dr inż. K. Zberecki przeprowadził modelowanie pasków z tych materiałów, o różnej pasywacji wodorem. Pokazał, że asymetria pasywacji może prowadzić do dużej gęstości spinowej na brzegu z podwójnym wodorem, i w konsekwencji do asymetrii w strukturze elektronowej, z aktywnym termoelektrycznie pasmem w pobliżu poziomu Fermiego. Obliczenia dla różnej szerokości pasków pokazały, że współczynnik dobroci termoelektrycznej spada ze wzrostem szerokości, co wskazuje na krawędziowy charakter termoelektryczności.

Wyniki te są ważne, bo pokazują, że asymetryczne paski węgla krzemu i azotku boru mają własności termoelektryczne bardziej korzystne niż w przypadku silicenu i grafenu. Publikacje te były cytowane ponad 20 razy.

Prace H.8-H.12 koncentrują się na badaniu obszernej rodziny polimerów węglowych (o różnych kształtach) i łańcuchów węglowych. Realne materiały termoelektryczne byłyby zbudowane z wielu takich pasków, łańcuchów polimerowych o różnej długości i konfiguracji, byłyby w dużym stopniu nieuporządkowane. Metodyka badań powinna być inna; modelowanie musiałoby uwzględnić nieporządek i kluczowe dla termoelektryczności procesy transportu elektronów i fononów między paskami, łańcuchami.

Podsumowując, rozprawa habilitacyjna prezentuje opublikowane w renomowanych czasopismach naukowych badania teoretyczne struktury elektronowej, uporządkowania magnetycznego, transportu elektronowego, w szczególności własności termoelektrycznych naomateriałów: silicenu, węgla krzemu i azotku boru. Prace naukowe dra inż. Krzysztofa Zbereckiego stymulowały wielu naukowców do dalszych badań tych materiałów i wniosły znaczący wkład w rozwój dyscypliny naukowej.

Ocena aktywności naukowej, dydaktycznej i organizacyjnej

Po doktoracie w roku 2008 dr inż. K. Zberecki przebywał na czteromiesięczny stażu w Instytucie Elektroniki, Mikroelektroniki i Nanotechnologii (IEMN) w Lille, Francja, gdzie modelował kwantowe lasery kaskadowe za pomocą metod Monte Carlo.

Dr inż. K. Zberecki działalność naukową prowadził zasadniczo w macierzystej uczelni Politechnice Warszawskiej. Zajmował się symulacjami komputerowymi i opublikował łącznie 29 prac, które były cytowane 410 razy przez innych autorów, a Jego indeks Hirscha wynosi 10. Warto wspomnieć o modelowaniu materiałów z lekkimi atomami (5 publikacji) i o badaniach stabilności nowych materiałów, gdzie rozwijał algorytmy globalnej optymalizacji oraz sztucznej inteligencji (4 publikacje). Habilitant wspomagał także grupy doświadczalne z kilku wydziałów Politechniki Warszawskiej, symulując widma fononowe konieczne do analizy różnych eksperymentów (3 publikacje).

W roku 2020 dr inż. K. Zberecki nawiązał bardzo obiecującą współpracę z prof. M. Batzilem i jego grupą z Uniwersytetu Południowej Florydy, USA. Przeprowadził symulacje komputerowe i wyznaczył stabilne struktury dichalkogenków metali przejściowych oraz określił ich własności magnetyczne. Dzięki symulacjom dynamiki molekularnej udało się wyjaśnić przebieg procesu tworzenia badanych nanostruktur w procesie MBE. Rezultaty opublikowano w czasopismach o bardzo wysokiej randze naukowej: Advanced Materials Interfaces, ACS Nano oraz Applied Physics Reviews (100, 200 oraz 200 pkt. wg. wykazu czasopism MNiSW).

Dr inż. K. Zberecki mało aktywnie uczestniczył w konferencjach. Wyniki swoich badań prezentował jedynie na 10 konferencjach międzynarodowych, w tym 1 wykład na zaproszenie (Rzym 2019), 4 wykłady i 5 posterów.

Niewielka była aktywność dra inż. K. Zbereckiego w projektach badawczych. Autoreferat wspomina o Jego uczestnictwie w dwóch grantach jako wykonawca: w projekcie zamawianym kierowanym przez prof. dr hab. Macieja Bugajskiego oraz projekcie NCN kierowanym przez prof. dr hab. Józefa Barnasia. Poza grantami obliczeniowymi, Habilitant nie zdobył środków finansowych na realizację własnych pomysłów naukowych.

Osiągnięcia dydaktyczne dra inż. K. Zbereckiego są typowe dla pracownika uczelni. Był On promotorem 5 prac inżynierskich oraz 6 prac magisterskich. Prowadził też zajęcia dydaktyczne: wykłady, ćwiczenia i laboratoria: z „Kwantowe metody, fizyki ciała stałego”, „Komputerowe metody symulacji”, „Zastosowanie metod *ab-initio* do wyznaczania właściwości materiałów”, „Wstęp do fizyki magnetyków”, oraz wykłady w języku angielskim „Physics I” i „Physics II” (na wydziale IBHiŚ) oraz „Modern physics” (na wydziale MEiL i MiNI). Niebawem ukarze się jego skrypt pt. „Podstawy obliczeniowe fizyki ciała stałego”.

O działalności organizacyjnej Habilitanta autoreferat wspomina jedynie o Jego współpracy nad oprogramowaniem dla Dziekanatu Wydziału Fizyki, o członkostwie Habilitanta w Komisji Dyplomowej Inżynierskiej dla specjalności „Materiały i nanostruktury” oraz o stronie WWW „Pracowni modelowania nowych materiałów”.

Rektor Politechniki Warszawskiej trzykrotnie nagroził dra inż. K. Zbereckiego za działalność naukową: nagrodą zespołową dwukrotnie w roku 2014 i 2016, oraz nagrodą indywidualną w roku 2020.

Wnioski końcowe

Mimo kilku uwag krytycznych (o skromnej aktywności konferencyjnej, grantowej i organizacyjnej) **uważam, że rozprawa habilitacyjna, całokształt dorobku naukowego i dydaktycznego dra Krzysztofa Zbereckiego spełniają kryteria zwyczajowe i określone w Ustawie. Popieram wniosek o nadanie Mu stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne.**



Poznań, 11 marca 2024 r.

Prof. dr hab. Bogdan Bułka