

**Ocena rozprawy habilitacyjnej oraz dorobku naukowego doktora  
Krzysztofa Zbereckiego w związku z postępowaniem o nadanie Mu  
stopnia doktora habilitowanego nauk fizycznych**

Pan Krzysztof Zberecki uzyskał tytuł magistra inżyniera na Wydziale Fizyki Politechniki Warszawskiej w 2002 r. na podstawie rozprawy pt.: “Korelacje cząstek nieidentycznych w eksperymencie STAR” napisanej pod kierownictwem prof. nzw. dr hab. Jana Pluty. Stopień doktora inżyniera otrzymał na tym samym wydziale w roku 2007 r., na podstawie rozprawy: “Korelacje oktupolowe w jądrach atomowych”, a jego promotorem w przewodzie doktorskim był prof. dr hab. inż. Piotr Magierski. Niedługo po obronie pracy doktorskiej został zatrudniony na swoim macierzystym wydziale, gdzie pracuje do dziś.

*Formalny opis pracy habilitacyjnej.*

Jako swoje osiągnięcie naukowe, podlegające ocenie w związku z Ustawą o stopniach i tytule naukowym dr Zberecki wskazał, zgodnie z Art.219, ust.1, p.2b odpowiedniej ustawy,<sup>1</sup> jednotematyczny cykl 13 prac [H1-H13] z lat 2013-2018 i opatrzył go tytułem: “Poszukiwanie struktur niskowymiarowych o optymalnych własnościach termoelektrycznych”. 12 prac cyklu zostało opublikowanych w czasopismach z listy JCR<sup>2</sup>. Dwie z prac cyklu opublikowanych zostało w czasopiśmie Physical Review B, cztery w Physical Chemistry Chemical Physics, po jednej w Journal of Magnetism and Magnetic Materials i Journal of Physics: Condensed Matter oraz dwie w Physica Status Solidi (b). Dwie prace cyklu opublikowano w Acta Physica Polonica A w ramach materiałów po konferencji Physics of Magnetism. Pierwsze siedem z wymienionych tu prac ukazała się w czasopismach o dość wysokim czynniku wpływu (3.91-3.09) i punktacji ministerialnej 140-100. Pozostałe ukazały się w nieco słabiej punktowanych czasopismach (70-40 p.). Ostatnia z prac cyklu [H13] jest monoautorskim rozdziałem w monografii dotyczącej nanomateriałów krzemowych. Całkowity czynnik wpływu tych prac wynosił 38.28.

Oprócz przeglądowej pracy [H13], publikacje cyklu habilitacyjnego są wspólnym dziełem kilku autorów. Do oceny wkładu dr. Zbereckiego konieczna jest więc analiza oświadczeń autorskich współpracowników Habilitanta. Prof. dr hab. Józef Barnas

---

<sup>1</sup>z dnia 20 lipca 2018 r. – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, zwaną dalej Ustawą

<sup>2</sup>JCR: Journal Citation Reports

oświadczył, że w publikacjach [H1-H8,H10] pomagał w interpretacji wyników numerycznych oraz w redakcji końcowej wersji manuskryptu. Prof. dr hab. Renata Świrkowicz w publikacjach [H1-H12] brała udział w dyskusji otrzymanych wyników oraz dokonywała wstępnej oceny manuskryptu. Udział dr. hab. inż. Michała Wierzbickiego, bardzo istotny w publikacjach [H1,H3,H6,H8,H10] cyklu dla obliczenia wydajności termoelektrycznej, polegał na wyznaczeniu wkładu fononowego do konduktancji termicznej, wyznaczeniu struktury fononowej silicenu i dyskusji otrzymanych wyników. W oświadczeniach tych, a także oświadczeniu dr. Zberekiego, nie znalazłem jasnej informacji który ze współautorów pełnił główną rolę w określeniu planu badań w każdej z prac i w sformułowania metodologii badawczej (ang. *conceptualization, methodology*). W tej sytuacji mogę sądzić, iż zgodnie z dość powszechnym w naszej specjalności zwyczajem rolę tę należy przypisać dr. Zberekiemu, który występował w każdej z wymienionych publikacji na pierwszym miejscu listy autorów, a ponadto w pracach cyklu oznaczony był jako autor korespondujący.

Podsumowując złożone oświadczenia współautorów oraz biorąc pod uwagę, że główny ciężar pracy w wytworzeniu publikacji polegał na dokonaniu obliczeń *ab initio* struktury elektronowej i elektronowych charakterystyk transportowych, co było dziełem dr. Zberekiego, mogę przyjąć, że Habilitant pełnił dominującą rolę w powstaniu publikacji i jego udział jest wyraźnie określony.

Przedmiotem rozprawy dr. Zberekiego jest analiza własności termoelektrycznych układów o strukturze kwaziejdnowymiarowej: wstążek silicenowych, BN, SiC, grafenowych i łańcuchów polimerowych. Układy te były w rozmaity sposób zdefektowane, domieszkowane lub pasywowane na krawędziach. Główny cel, jaki postawili przed sobą autorzy, to znalezienie układów o możliwie najwyższej wartości wydajności termoelektrycznej (ang. *figure of merit*) oraz określenie, jakie warunki pod względem składu chemicznego oraz struktury przestrzennej i elektronowej takie układy powinny spełniać. Autorzy koncentrują się zwłaszcza na własnościach istotnych dla gałęzi badań zwanej spintroniką, w której sterowanie transportem elektronów odbywa się poprzez oddziaływanie na ich spin, co prowadzi do konieczności obliczenia spinowo-zależnych charakterystyk transportowych badanych układów. Do wyznaczenia tych własności w pracach [H1-H13] używana jest przede wszystkim teoria funkcyjności gęstości (DFT), która w oparciu o wyznaczone na jej podstawie widmo kwazicząstek elektronowych (Kohna–Shama) pozwala na określenie funkcji transmisji elektronowej. Wyliczona w ten sposób funkcja transmisji używana jest następnie, w ramach teorii Landauera, do znalezienia współczynników transportowych, które pozwalają wyliczyć mierzalne własności układu: przewodnictwo elektryczne, siłę termoelektryczną i udział elektronowy w przewodnictwie cieplnym.



Zawartość ocenianego cyklu prac jest zdecydowanie jednorodna, zarówno z punktu widzenia głównego przedmiotu i celu badań, jak i pod względem stosowanej w niej metodologii badawczej. W tej sytuacji oraz przy uwzględnieniu omówionych wyżej oświadczeń współautorów prac cyklu, formalne warunki, określone w Ustawie w Art.219, ust.1, p.2b oraz ust.2, jakie powinno spełniać osiągnięcie naukowe stanowiące podstawę postępowania habilitacyjnego można uznać za spełnione.

*Dyskusja wyników uzyskanych w pracy habilitacyjnej.*

Ocena wartości naukowej rozprawy wymaga krótkiego wprowadzenia do użytej w pracach cyklu metodologii badawczej. Wykorzystany w nich został pakiet SIESTA, realizujący typowe obliczenia DFT, w tym optymalizację struktury przestrzennej układu i określenie przestrzennego rozkładu magnetyzacji.<sup>3</sup> Do wyznaczenia wartości funkcji transmisji, niezbędnej do wyliczenia wszystkich współczynników transportowych, użyto programu TRANSIESTA. Jest on oparty o metodę funkcji Greena, tradycyjnie używaną do opisu rozpraszania cząstek w obszarach przestrzennie niejednorodnych i wchodzi w skład pakietu SIESTA. W ramach tej procedury badany układ dzieli się na półnieskończone periodyczne elektrody (źródła i dreny) i centralny obszar rozpraszania, zwykle fizycznie rozróżnialny od elektrod. Wyznaczenie funkcji transmisji, w ogólnym przypadku dość żmudne numerycznie, da się uprościć, gdy obszar rozpraszania nie różni się od elektrod. Do wyliczenia transmisji wystarcza wtedy znajomość liczby kanałów przewodzenia dla każdej wartości energii, możliwa do otrzymania bezpośrednio z energii kwazicząstek Kohna-Shama, znanej już z obliczeń DFT.

W cyklu prac cząstki o różnych spinach traktowano jako niezależne, t.j. zastosowano przybliżenie pomijające procesy relaksacji spinowej. Uprościło to obliczenie istotnych dla spintroniki charakterystyk transportowych: polaryzacji spinowej, prądu spinowego, magnetotermosily, spinowej wydajności termoelektrycznej i innych.

Badane układy były wysokiego poziomu idealizacją sytuacji eksperymentalnej, m.in. pominięto oddziaływanie wstążek i łańcuchów polimerowych z podłożem. Ponadto elektrody przyjęto jako identyczne z materiałem obszaru rozpraszania, jeśli nie liczyć defektów obecnych w obszarze centralnym.

W poszczególnych pracach zbadano własności termoelektryczne wstążek lub łańcuchów różniących się budową chemiczną. Wstążki silicenowe były analizowane w pracach [H1-H5]. W pracy [H6] obiektami badanymi były wstążki krzemowo-węglowe, w pracy [H7] borowo-azotowe, w pracach [H8-H10] szewronokształtne

---

<sup>3</sup>W autoreferacie Habilitant podaje informację o wykorzystaniu również pakietu Quantum Espresso, jednak w żadnej z prac cyklu nie znalazłem o tym wzmianki.

wstążki grafenowe, a w [H11,H12] łańcuchy polimerowe pierścieni fenyłowych połączonych mostkami nitrozowymi. Do analizy wybrano układy potencjalnie interesujące ze względu na swoje zastosowania spintroniczne, dzięki stabilnym stanom uporządkowanym magnetycznie.

Prace [H1-H12] zawierają znaczną ilość oryginalnych i wartościowych wyników szczegółowych, prowadzących w sumie do ogólnych wskazówek w jakich układach warto poszukiwać wysokich wartości efektywności termoelektrycznej i istotnych dla zastosowań spintronicznych charakterystyk transportowych. Do najważniejszych wyników uzyskanych przez Habilitanta zaliczam:

1. znalezienie rozwiązań magnetycznych: antyferromagnetycznego (AFM) i ferromagnetycznego (FM), w zygzakowych wstążkach silicenowych (zSi-NR) pasywowanych wodorem [H1] i wyznaczenie termosily (dla rozwiązania FM także magnetotermosily i magnetorezystancji) [H1] dla różnych wartości temperatur w zależności od potencjału chemicznego,
2. zbadanie wpływu defektów domieszkowania zSi-NR atomami P,Al w różnych położeniach na wstążce na zależność charakterystyk termoelektrycznych, ładunkowych i spinowych (w przypadku FM), od potencjału chemicznego [H2],
3. pokazanie, że zSi-NR asymetrycznie pasywowane wodorem wykazują stabilne rozwiązanie FM półprzewodzące, co sprzyjało uzyskaniu wysokiej wartości termosily i spinowej termosily oraz znacznej wartości wydajności termoelektrycznej [H3],
4. znalezienie wyjątkowo wysokich wartości wydajności termoelektrycznej (rzędu 30) w niektórych z analizowanych układów: zBN-NR [H7], szewronowych G-NR domieszkowanych atomami Al,N [H8] i funkcjonalizowanych grupami nitrozowymi [H10] - wartości te były znacznie wyższe, niż znane z eksperymentu lub innych prac teoretycznych.

*Ocena pracy habilitacyjnej: podsumowanie.*

Cykl prac [H1-H13] nie zawiera nowości metodologicznych ani oryginalnych wyników analitycznych. Przedstawione w nim wyniki numeryczne odnoszą się do modeli układów nanoskopowych będących na wysokim poziomie idealizacji w stosunku do możliwych realizacji eksperymentalnych. Używane są w nim jednak dobrze sprawdzone podejścia obliczeniowe, bazujące na aktualnym stanie wiedzy (ang. *state of art*) i odpowiednie do tych układów. Ze względu na stosowane przybliżenia, otrzymanych wyników liczbowych określających charakterystyki termoelektryczne nie należy



traktować literalnie, ale raczej jako użyteczne wskazówki dla kierunków poszukiwań doświadczalnych niezwykle cennych z praktycznego punktu widzenia układów. Uzyskane rezultaty stanowią też ważny punkt odniesienia dla dalszych poszukiwań teoretycznych z zastosowaniem bardziej zaawansowanych metod. Zawarte w cyklu prace znalazły szerokie uznanie w społeczności badaczy, co odzwierciedlone zostało pokaźną liczbą cytowań prac cyklu: pierwsze trzy prace cyklu cytowano 114, 56 i 33 razy (odpowiednio), prace [H1-H13] cytowane były w sumie 250 razy. Stwierdzam, że wyniki Habilitanta przedstawione w cyklu prac [H1-H13] stanowią istotny wkład w rozwój fizyki, a w szczególności mają duże znaczenie dla rozwoju wiedzy o własnościach termoelektrycznych układów nanoskopowych.

*Ocena całkowitego dorobku naukowego Habilitanta.*

Całkowity dorobek naukowy dr. Zbereckiego jest dość pokaźny i różnorodny. Są w nim prace z dziedziny fizyki jądra atomowego: [A1] oraz trzy wcześniejsze prace sprzed doktoratu. Pięć publikacji Habilitanta dotyczyło nowych (w tym dwuwymiarowych) materiałów magnetycznych [B1-B5]. Trzy prace [C1-C3], które Habilitant opublikował współpracując z grupami doświadczalnymi Politechniki Warszawskiej, dotyczyły zjawisk dynamicznych w nanostrukturach, przy czym jego wkład polegał na obliczeniu modów fononowych i porównaniu wyników z danymi doświadczalnymi. Zajmował się również poszukiwaniem nowych materiałów metodami globalnej optymalizacji (prace [D1-D3]), tworząc dla tego celu autorski kod oparty na algorytmie genetycznym. W ostatnich latach współpracował z naukowcami z Uniwersytetu Południowej Florydy, publikując wraz z nimi prace [E1-E3] dotyczące dwuwymiarowych dichalkogenków metali przejściowych, a jego wkład polegał m.in. na wykonaniu symulacji tworzenia nanostruktur metodami dynamiki molekularnej. Warto zauważyć, że wysokopunktowana (200 p.) publikacja [E2] z ACS Nano z 2020 r. uzyskała już do tej chwili ponad 70 cytowań.

W sumie w bazie danych w WebOfScience (w indeksie SCI) znaleźć można 30 prac dr Zbereckiego. W zdecydowanej większości (21) jego nazwisko występuje na pierwszym miejscu listy autorów, ponadto w czterech pracach jest jedynym autorem, co mówi bardzo dobrze o jego samodzielności naukowej. Swoje wyniki przedstawiał także na 10 konferencjach międzynarodowych, w tym jeden raz na zaproszenie. Prace Habilitanta są w sumie cytowane 410 razy przez innych autorów<sup>4</sup>, całkowity sumaryczny czynnik wpływu jego prac wynosi 108.51, a jego indeks Hirscha 10. Są to bardzo dobre dane bibliometryczne, jak na kandydata do stopnia doktora habilitowanego. Aktywność badawcza dr. Zbereckiego została doceniona przez JM Rektora Politechniki Warszawskiej, przyznaniem mu nagród I stopnia za działalność

---

<sup>4</sup>przycitam dane z dnia złożenia wniosku

naukową (dwóch zespołowych i jednej indywidualnej).

W ramach swojej działalności dydaktycznej dr Zberecki prowadził szereg ćwiczeń, zajęć laboratoryjnych, a także wykładów, głównie z tematyki materii skondensowanej. Prowadził też zajęcia z fizyki ogólnej, mechaniki kwantowej i przedmiotów informatycznych. Habilitant posiada również pewien dorobek organizacyjny: m.in. współtworzył oprogramowanie dla Dziekanatu Wydziału Fizyki służące do zarządzania przebiegiem studiów.<sup>5</sup>

Po uzyskaniu stopnia doktora Habilitant zdobywał doświadczenia badawcze w Instytucie Elektroniki, Mikroelektroniki i Nanotechnologii (IEMN) w Lille, gdzie w 2008 r. odbył czteromiesięczny staż naukowy. Ostatnio współpracował także z naukowcami z Uniwersytetu z Południowej Florydy, co przyniosło 3 omówione wyżej wspólne publikacje. Można to uznać (w szerszym sensie) jako spełnienie wymagania określonego w p.3, ust.1, Art.219 Ustawy.

*Podsumowanie i wniosek końcowy.*

Podsumowując omówione wyżej osiągnięcia Habilitanta uważam, że wartość zawartego w cyklu prac [H1-H13] osiągnięcia habilitacyjnego i całkowitego dorobku naukowego dr. Krzysztofa Zbereckiego spełniają warunki określone przez Ustawę oraz wnoszę o dopuszczenie Kandydata do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

prof. dr hab. Tomasz Kostyrko



---

<sup>5</sup>Należy zauważyć, że Ustawa nie mówi nic o konieczności oceny dorobku dydaktycznego i organizacyjnego kandydata do stopnia doktora habilitowanego.