

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

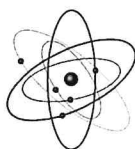
Dr hab. inż.
Jakub Cieślak
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Akademii Górniczo-Hutniczej im. S. Staszica w Krakowie

Kraków, dn. 3 grudnia 2018

**Ocena osiągnięcia naukowego przedstawionego do postępowania
habilitacyjnego oraz dorobku naukowego, dydaktycznego i
organizacyjnego dr inż. Bartłomieja Wiendlochy pt.:**
*Domieszki rezonansowe w materiałach termoelektrycznych – struktura
elektronowa i własności transportowe.*

Sylwetka Habilitanta

Dr inż. Bartłomiej Wiendlocha jest absolwentem Fizyki na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej im. Stanisława Staszica w Krakowie. Tam, w 2004 roku z wyróżnieniem obronił swoją pracę magisterską (*Obliczenia własności elektronowo-fononowych nadprzewodników o strukturze MgB_2 i $MgCNi_3$*) a następnie w 2009r, również z wyróżnieniem, rozprawę doktorską (*Teoretyczne badania własności nadprzewodzących i magnetycznych wybranych układów międzymetalicznych*), obydwie pod naukową opieką dr hab. Janusza Tobiły. Po obronie habilitant kontynuował swoją działalność naukową dotyczącą układów nadprzewodzących na stanowisku adiunkta na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej swojej macierzystej uczelni, podjął także współpracę z Uniwersytetem w Ohio (trzy kilkumiesięczne wyjazdy habilitanta), która zaowocowała wieloma wspólnymi publikacjami. Nie stronił także od podejmowania nowych wyzwań, np. w zakresie teoretycznych badań materiałów magnetycznych, magnetokalorycznych i termoelektrycznych. Wyniki uzyskane dla domieszek rezonansowych w układach z ostatniej z wymienionych grup, zostały zebrane i przedstawione w formie niniejszego osiągnięcia naukowego.



Ocena osiągnięcia naukowego

Tematyka podjęta przez habilitanta dotyczy materiałów termoelektrycznych, umożliwiających konwersję energii cieplnej na elektryczną. Zjawiska termoelektryczne znane co do idei już z początków 19 wieku, napotykają na poważne problemy natury technologiczno-materiałowej, na etapie praktycznej realizacji generatorów czy urządzeń chłodzących, działających z ich wykorzystaniem. Wymagania dotyczące materiałów termoelektrycznych, które powinny charakteryzować się wysokim przewodnictwem elektrycznym, wysoką termosiłą i równocześnie niskim przewodnictwem cieplnym są bardzo wysokie, jednak korzyści ekonomiczne związane z wykorzystaniem generatorów prądu czy urządzeń chłodzących działających w oparciu o efekt Seebecka lub Peltiera są nie do przecenienia. W tym kontekście badania struktury elektronowej konkretnych układów atrakcyjnych pod względem termoelektrycznym, pozwalające wyjaśnić obserwowane zjawiska a także przewidzieć własności nowych materiałów, mogą zaproponować nowe rozwiązania i ukierunkować badania eksperymentalne na nowe układy.

Przedstawiony cykl publikacji jest przykładem umiejętnego zastosowania zaawansowanych metod obliczeniowych z zakresu teoretycznej fizyki ciała stałego, do zbadania wpływu wybranych domieszek na strukturę elektronową materiału, przy czym interesujące dla autora okazały się szczegółowe opisy ich stanu rezonansowego, w aspekcie potencjalnej tendencji do jego lokalizacji i tworzenia pasma. Na rozprawę składa się poprzedzony autoreferatem cykl dwunastu prac, w czterech z nich habilitant jest jedynym, a w kolejnych dwóch – pierwszym autorem. Prace w przeważającej większości zostały opublikowane w dobrych czasopismach z Listy Filadelfijskiej, ich sumaryczny *Impact Factor* wynosi 70.6. Warto wspomnieć, że dwie z prezentowanych prac (H1 i H3) odznaczają się bardzo wysoką liczbą cytowań (odpowiednio 73 i 316, na dzień 04.12.2018).

Praca H1 dotyczy stanów rezonansowych w stopach będących modyfikacjami obiecującego układu PbTe, a mianowicie Pb(Te-Se) oraz Pb(Te-S) domieszkowanych Tl, i jest niejako odpowiedzią na eksperymentalnie stwierdzony w tych układach brak zależności termosiły od zawartości domieszek w szerokim zakresie koncentracji. Na podstawie analizy wyznaczonej gęstości stanów elektronowych w wymienionych układach potwierdzono istnienie stanu rezonansowego i utrzymanie niezmiennego kształtu funkcji gęstości stanów do kilkunastu procent podstawienia. W pracy zaproponowano także mechanizm powstawania stanów rezonansowych, polegający nie tyle na wprowadzaniu *lokalnych* stanów związanych ściśle z atomami domieszki, co na zaburzeniu stanów Blochowskich. W kolejnej pracy H2 habilitant badał stany rezonansowe w układach Bi oraz Bi-Sb domieszkowanym litem i

przewidział ich obecność o ile atomy Li będą obsadzały pozycje Bi lub Sb. Przewidywania teoretyczne habilitanta dotyczące skutków obsadzania luk międzywęzłowych atomami domieszki znalazły potwierdzenie eksperymentalne.

Teoretyczne analizy dotyczące wpływu stanu rezonansowego na termosilę zostały zeprezentowane w kolejnej pracy H3. Rozważania autora na temat mechanizmu wzrostu termosily spowodowanego obecnością stanu rezonansowego przy uwzględnieniu poprawek elektron-fonon w różnych temperaturach należy uznać za ważny wkład w zrozumienie tego zjawiska, zwłaszcza, że zostały one potwierdzone eksperymentalnie na próbkach PbTe domieszkowanych Tl. Wnioski habilitanta dotyczące konieczności pochodzenia piku w gęstości stanów nie od pasma domieszkowego, ale jako efektu modyfikacji oryginalnego pasma walencyjnego okazały się słuszne.

Temu samemu układowi poświęcona jest praca H4, tutaj jednak zostaje uwzględniony nieporządek chemiczny przez zastosowanie obliczeń metodą KKR z zastosowaniem przybliżenia koherentnego potencjału. W celu opisu pasm elektronowych, skutecznie zastosowano formalizm funkcji spektralnych, wykazując istnienie stanu rezonansowego przy równoczesnym braku pasma domieszkowego w pobliżu krawędzi pasma walencyjnego. Szczegółowo został także wyjaśniony mechanizm działania domieszki, przesuwałej stany elektronowe w kierunku krawędzi pasma, gdzie mogą dawać wkład do zjawisk transportowych, podnosząc ostatecznie termosilę materiału. Podobne obliczenia zostały przeprowadzone w pracy H5 dla układu PbTe domieszkowanego tytanem, tym razem jednak habilitant wykazał formowanie się wąskiego pasma domieszkowego co nie prowadzi do poprawienia własności transportowych i w konsekwencji do zwiększenia termosily.

Kolejną klasą analizowanych przez habilitanta materiałów termoelektrycznym są te oparte na Mg_2Sn . W pracy H6 przeanalizowany został wpływ domieszek Ag na własności takich materiałów, które co prawda tworzą zdelokalizowany stan rezonansowy, ale – jak to zostało stwierdzone doświadczalnie - nie prowadzi to do podniesienia termosily. Obliczenia habilitanta pokazały, że odpowiedzialnym za ten fakt mogą być podstawienia Ag na pozycje Mg zamiast na Sn (co nie prowadzi do stanu rezonansowego) jak również problemy eksperymentalne, z utrzymaniem właściwej stechiometrii na etapie przygotowania próbek.

Tworzenie głębokiego stanu rezonansowego (znacznie poniżej energii Fermiego) w układzie Bi domieszkowanym indem jest analizowane w pracy H7. Trójwartościowy atom In, po podstawieniu za również trójwartościowy atom Bi, powoduje związanie dwóch elektronów a w rezultacie pojawienie się dwóch dziur w pasmie walencyjnym. Habilitant tłumaczy w ten sposób zaobserwowane eksperymentalnie akceptorowe zachowanie In w Bi i zwraca uwagę, że pozwala to

projektować układy z brakiem rozpraszania nośników na zjonizowanych atomach domieszki. Analogiczne obliczenia przeprowadzone dla układów domieszkowanych Ga oraz Sn potwierdzają zaproponowane przez habilitanta mechanizmy.

Praca H8 ma charakter przeglądowy a udział habilitanta sprowadza się przede wszystkim do autorstwa części poświęconej domieszkom rezonansowym i przedstawienia niektórych bardziej szczegółowych wyników, najczęściej w odniesieniu do układów analizowanych już wcześniej.

W pracy H9 habilitant kontynuował badania stanów rezonansowych, tym razem w układach: Bi_2Te_3 , $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ i Bi_2Se_3 , domieszkowanych cyną, uzyskując po raz kolejny stany rezonansowe. Ze względu na akceptorowy charakter cyny w tych układach i trudności eksperymentalne w przygotowaniu próbek dla wyższych koncentracji domieszki, rozważane były różne lokalizacje dodatkowych defektów w komórce elementarnej, pojawiających się w rzeczywistych próbkach. Habilitant zaproponował też i szczegółowo opisał mechanizm podwójnego domieszkowania (np. cyną i wapniem lub magnezem) który pozwala ominąć trudności eksperymentalne osiągając stan rezonansowy przy mniejszej koncentracji Sn.

Ciekawe, choć nieco dyskusyjne i póki co – nie powtórzone wyniki eksperymentalne skłoniły habilitanta do analizy układów Bi-Sb domieszkowanych potasem, co zostało opisane w pracy H10. I tym razem przewidziany został stan rezonansowy jednak otrzymane wyniki czekają jeszcze na eksperymentalną weryfikację.

Kolejny, analizowany w pracy H11 przez habilitanta układ to As_2Te_3 domieszkowany cyną, o strukturze krystalicznej typu Bi_2Te_3 jak w pracy H9. Na podstawie obliczeń habilitant potwierdził istnienie stanu rezonansowego i jego korzystny wpływ na termosiłę w tym układzie, rozszerzył też obliczenia umożliwiając lepsze zrozumienie istniejących dotychczas wyników eksperymentalnych.

Wreszcie w ostatniej z omawianych prac, H12, habilitant zestawia wyniki obliczeń funkcji transportowych, oporności resztkowej, czasów życia nośników i termosiły dla dwóch niejako modelowych materiałów termoelektrycznych ze stanami rezonansowymi a więc konstantanu Cu-Ni oraz PbTe:Tl. Aby podkreślić wpływ stanu rezonansowego na dyskutowane wartości, analizie został poddany także układ w którym ten stan się nie tworzy, PbTe:Na. Co ważne, swoje obliczenia habilitant przeprowadza przy użyciu formalizmu Kubo-Greenwooda starając się uniknąć stosowanych wcześniej przybliżeń. Szczegółowe wyniki otrzymane praktycznie z pierwszych zasad, zwłaszcza w zestawieniu z układem bez stanu rezonansowego w sposób jednoznaczny potwierdzają pozytywny wpływ tego ostatniego na wzrost termosiły, wyjaśniają jego mechanizm i rozstrzygają między różnymi funkcjonującymi w literaturze modelami.

Jak to zostało stwierdzone w autoreferacie i jest poparte oświadczeniami współautorów, we wszystkich pracach wieloautorskich główna rola habilitanta polega na

wykonaniu obliczeń, które pozwalają zinterpretować wyniki pomiarów, a w niektórych przypadkach je inspirują. Wszystkie (za wyjątkiem ostatnich, najmłodszych) prace są cytowane i spora liczba cytowań pochodzi z prac o charakterze eksperymentalnym lub eksperymentalno-teoretycznym. Świadczy to z jednej strony o aktualności tematów podejmowanych przez habilitanta, a z drugiej – o skuteczności prowadzonych obliczeń, które wytrzymują krytykę eksperymentu. Podkreślić należy, że duża cytowalność prac habilitanta jest bezwzględnym i obiektywnym wyznacznikiem ich wartości.

Ocena dorobku naukowego

Dr inż. Bartłomiej Wiendlocha jest współautorem 22 publikacji naukowych z lity JCR nie ujętych w osiągnięciu habilitacyjnym, z czego 16 ukazało się po obronie doktoratu. Jest także autorem lub współautorem rozdziałów w trzech monografiach (jedna po doktoracie). Swoje wyniki prezentował na konferencjach w formie plakatów (11 w których był autorem prezentującym i ponad 40 innych) oraz 19 wystąpień ustnych, z czego pięć miało charakter referatu zaproszonego. Na uwagę zasługuje rola współorganizatora i wykładowcy Międzynarodowej szkoły letniej *Euroschool 2018*, oraz rola współorganizatora konferencji *15th International Conference on Solid Compounds of Transition Elements*, Kraków 2006. Jego osiągnięcia naukowe, i umiejętności zostały także docenione poprzez powierzenie mu funkcji recenzenta w wielu wiodących czasopismach fizycznych, był także recenzentem dla francuskiej *ANR – Agence Nationale de la Recherche*. W trakcie swojej kariery naukowej przebywał w wiodących laboratoriach naukowych zajmujących się tematyką związaną z jego zainteresowaniami naukowymi (Laboratorium Krystalografii CNRS Grenoble, Institut Néel, CNRS Grenoble czy Ohio State University, Department of Mechanical and Aerospace Engineering), co zaowocowało wspólnymi publikacjami.

Obecnie jest kierownikiem jednego projektu badawczego, a w ośmiu już zakończonych pełnił rolę wykonawcy. Jest też laureatem stypendiów (trzykrotny laureat Stypendium Ministra Edukacji Narodowej za szczególne osiągnięcia w nauce) i nagród, przyznawanych przez gremia związane zarówno z macierzystą uczelnią AGH, jak i z innymi jednostkami naukowymi.

Jak wynika z powyższego skrótowego zestawienia habilitant prowadzi intensywną działalność publikacyjną, owocnie współpracuje z zagranicznymi ośrodkami naukowymi, zwraca także uwagę różnorodność tematyczna podejmowanych badań. Dorobek naukowy habilitanta oceniam bardzo wysoko.

Ocena działalności dydaktycznej

Dr inż. Bartłomiej Wiendlocha był promotorem siedmiu prac inżynierskich i trzech prac magisterskich (jedna w realizacji) a w chwili obecnej pełni rolę opiekuna naukowego (docelowo promotora) w przewodzie doktorskim. W swojej macierzystej jednostce prowadził zajęcia laboratoryjne, ćwiczenia oraz wykłady związane tematycznie z fizyką, tak ogólne jak i specjalistyczne. Dał się poznać także jako popularyzator nauki. Jego dorobek dydaktyczny oceniam jako solidny i satysfakcjonujący.

Wniosek

Stwierdzam, że zarówno pod względem merytorycznym jak i formalnym, przedstawiona do oceny dokumentacja stanowiąca podstawę do ubiegania się o stopień doktora habilitowanego w dziedzinie *nauki fizyczne* w dyscyplinie *fizyka* w przewodzie habilitacyjnym dr inż. Bartłomieja Wiendlochy spełnia stawiane ustawowo wymogi, a osiągnięty dorobek naukowy habilitanta uzasadnia ubieganie się o stopień doktora habilitowanego nauk fizycznych w dyscyplinie *fizyka*. Wysoko oceniam wyniki przedstawione w autoreferacie oraz dorobek naukowy habilitanta. Wnoszę o dopuszczenie dr inż. Bartłomieja Wiendlochy do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

Biorąc pod uwagę przeprowadzone zaawansowane obliczenia struktury elektronowej, wyniki przedstawione w autoreferacie oraz oddźwięk jaki wzbudziły w środowisku naukowym a także pozostały przedstawiony do oceny dorobek habilitanta, stawiam wniosek o wyróżnienie rozprawy habilitacyjnej dr inż. Bartłomieja Wiendlochy.

Dr hab. inż.

Jakub Cieślak

