

Prof., dr hab. Ryszard Buczek  
Instytut Fizyki PAN  
Warszawa

Warszawa, 22 czerwca 2020 r.

**Ocena osiągnięcia naukowego dr. Jakuba Kaczkowskiego w związku z przeprowadzanym postępowaniem habilitacyjnym.**

Dr Jakub Kaczkowski od wielu lat związany jest z Instytutem Fizyki Molekularnej PAN w Poznaniu. Pracuje w Zakładzie Teorii Ciała Stałego zajmując się badaniami własności różnych kryształów półprzewodnikowych oraz metalicznych. Jest autorem oraz współautorem 32 prac dotyczących między innymi azotków, tlenków, skutterudytów, półprzewodników o strukturze wurcytu, grafenu oraz wybranych multiferroików. Dr. Kaczkowski interesował się nie tylko strukturą krystaliczną oraz strukturą pasm elektronowych badanych kryształów, ale również ich własnościami magnetycznymi i ferroelektrycznymi, także wpływem pól zewnętrznych oraz wpływem domieszkowania metalami przejściowymi 3d oraz ziemiami rzadkimi na te własności. Dr. Kaczkowski w swoich badaniach posługuje się głównie obliczeniami z pierwszych zasad w ramach teorii funkcjonału gęstości. Jego prace cytowane są 214 razy z indeksem Hirsha równym 9. W czerwcu 2011 roku obronił on doktorat zatytułowany: „Wpływ defektów na własności elektronowe i magnetyczne wybranych półprzewodników o strukturze wurcytu – obliczenia z pierwszych zasad”.

Dr Jakub Kaczkowski jako swoje osiągnięcie naukowe zgłosił zbiór 8 prac pod wspólnym tytułem „Wybrane właściwości związków bizmutu na bazie tlenków metali – obliczenia za pomocą teorii funkcjonału gęstości”. Prace zostały opublikowane w czasopismach o zasięgu międzynarodowym: Journal of Alloys and Compounds, Journal of Material Science, Materials Chemistry and Physics, Computational Materials Science oraz Acta Physica Polonica. Przedstawiają one wyniki obliczeń różnych interesujących własności związków bizmutu na bazie tlenków Al, Ga, Fe, Ni i Pd. Mogą być one zarówno magnetyczne jak i piezo- i ferroelektryczne. Należą do obiecujących zamienników perowskitów na bazie ołowiu. Związki bizmutu posiadają jednak znacznie większą różnorodność faz. Przy pomocy ciśnienia hydrostatycznego oraz domieszkowania jonami ziem rzadkich można zmieniać ich strukturę krystaliczną oraz sterować

właściwościami. W szczególności można próbować doprowadzić do współistnienia dwu różnych faz o różnych właściwościach. Dzięki sprzężeniu spin-orbita mogą się w nich także tworzyć tekstury spinowe. Wszystkie wymienione cechy czynią te związki interesującymi ze względu na zastosowania w elektronice i spintronice, w ultrasonografach, pamięciach ferroelektrycznych i różnych przyrządach badawczych.

Dr Kaczkowski w zgłoszonym zbiorze prac przedstawia wyniki swoich badań dotyczących szczegółowych własności poszczególnych materiałów tlenkowych na bazie bizmutu. Dołączony autoreferat sprawnie prowadzi czytelnika przez opublikowane prace uwypuklając wyniki, które autor uważa za swoje główne osiągnięcia.

- Dr. Kaczkowski pokazał, że przy pomocy słabego domieszkowania atomami pierwiastków ziem rzadkich można doprowadzić do współistnienia fazy romboedrycznej i faz rombowych w kryształach  $\text{BiFeO}_3$ . Pozwala to na przełączanie faz o różnych właściwościach przy pomocy pola elektrycznego.
- Pokazał również, że przy pomocy ciśnienia hydrostatycznego można doprowadzić do współwystępowania trzech różnych faz polarnych w  $\text{BiGaO}_3$ .
- Wyjaśnił mechanizm powstawania przerwy energetycznej w  $\text{BiNiO}_3$  i  $\text{BiPd}_2\text{O}_4$  oraz wpływ domieszkowania na zaburzenie uporządkowania ładunkowego i na przejścia fazowe w badanych materiałach.
- Analizował mechanizmy, które wpływają na własności ferroelektryczne  $\text{BiFeO}_3$  przy domieszkowaniu kryształu itrem. Pokazał, że zarówno mechanizm geometryczny jak i elektronowy wpływają na poprawę właściwości ferroelektrycznych.
- Opisał właściwości strukturalne, elektronowe, fononowe i ferroelektryczne materiałów  $\text{BiAlO}_3$  i  $\text{BiGaO}_3$ . Wyzначył również wartości częstości modów ramanowskich w punkcie  $\Gamma$ , co pozwoliło na przypisanie symetrii modów do wartości eksperymentalnych.

Przedstawione przez Habilitanta prace są metodologicznie spójne. Ich wyniki wpisują się w intensywne badania dotyczące materiałów tlenkowych na bazie bizmutu i w znacznym stopniu rozszerzyły dotychczasową wiedzę na temat tych materiałów. Pozwalają na lepszą interpretację prowadzonych eksperymentów jak i na przewidywanie własności materiałów do tej pory słabo eksperymentalnie przebadanych. Wskazują również, które z tych związków i w jakim zakresie mogą być zamiennikami dla związków o strukturze perowskitu zawierających ołów. Pozwalają

na lepsze zrozumienie mechanizmów odpowiedzialnych za ich właściwości elektronowe, ferroelektryczne i magnetyczne. W trakcie swoich obliczeń dr Kaczkowski stosował obliczenia z pierwszych zasad w ramach teorii funkcjonału gęstości. Używał różnych przybliżeń dla opisu funkcjonału wymiany i korelacji. Porównanie otrzymywanych wyników, a także wyznaczenie współczynników w metodzie DFT+U stanowi także cenne osiągnięcie, ułatwiające innym badaczom poprawny opis materiałów o strukturze perowskitu.

Uważam, że dr Kaczkowski podjął ważny temat i wykazał się opanowaniem adekwatnych technik teoretycznych pozwalających na jego realizację. Jak wynika z dołączonych oświadczeń współautorów przy realizacji badań wykazał się dużą samodzielnością. Poza uczestniczeniem w realizacji dwóch krajowych grantów był też kierownikiem grantu NCN: „Wpływ domieszkowania i ciśnienia hydrostatycznego na wybrane właściwości tlenków o strukturze perowskitu”.

Z racji zatrudnienia w placówce PAN dr Kaczkowski nie ma bogatego dorobku dydaktycznego. Prowadził jedynie jeden kurs dla doktorantów. Swoje prace przedstawiał natomiast na wielu konferencjach wygłaszając cztery referaty oraz przedstawiając wiele prezentacji plakatowych.

Podsumowując przedstawione przez dr Kaczkowskiego osiągnięcia, jego ogólny dorobek naukowy, dużą samodzielność potwierdzoną także kierowaniem grantem NCN, uważam, że spełnia on kryteria oceny kandydata wymienione w Rozporządzeniu Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego warunkujące nadanie stopnia doktora habilitowanego. Wnioskuje więc o dopuszczenie go do dalszych etapów postępowania.



Ryszard Buczko