

**Recenzja rozprawy habilitacyjnej pt.  
"Wybrane właściwości związków bizmutu na bazie tlenków metali – obliczenia  
za pomocą teorii funkcjonału gęstości"  
oraz dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego  
dr inż. Jakuba Kaczkowskiego.**

Dr inż. Jakub Kaczkowski ukończył studia wyższe na Wydziale Fizyki Technicznej Politechniki Poznańskiej w 2006 roku. Wybraną specjalnością były symulacje komputerowe i fizyka komputerowa a pracę magisterską z zakresu teorii węzłów napisał pod opieką prof. dr. hab. Piotra Pierańskiego. Po ukończeniu studiów dr Kaczkowski związał się z Instytutem Fizyki Molekularnej PAN w Poznaniu, najpierw jako słuchacz studium doktoranckiego a następnie, po uzyskaniu tytułu doktora w 2011 roku, jako adiunkt. Promotorem pracy doktorskiej pt.: „Wpływ defektów na właściwości elektronowe i magnetyczne wybranych półprzewodników o strukturze wurcytu – obliczenia z pierwszych zasad” był prof. dr hab. Andrzej Jezierski. Tytuł rozprawy sygnalizuje, że w swojej działalności badawczej dr Kaczkowski skoncentrował się na stosowaniu metod obliczeniowych określanych jako metody z pierwszych zasad (inaczej -- *ab initio*). Swoją wiedzę i umiejętności w tym zakresie Habilitant doskonalił w trakcie miesięcznego pobytu w grupie prof. Blügel z Peter Grünberg Institute, Juelich Forschungszentrum. Niestety w życiorysie naukowym kandydata brak jest innych, zwłaszcza długoterminowych staży naukowych.

**Parametryczna ocena dorobku naukowego dr inż. Jakuba Kaczkowskiego**

Dr inż. Jakub Kaczkowski jest autorem 33 publikacji (32 w momencie składania wniosku) z listy Journal Citation Reports (JRC, stan w momencie składania wniosku), z czego 25 opublikował po uzyskaniu doktoratu. Sumaryczny Impact Factor wynosi IF=52,9, co daje średnio na publikacje IF=1,6. Należy zaznaczyć, że na liście czasopism nie brak bardzo dobrych pozycji takich jak np. *Journal of Alloys and Compounds* (IF=4,65; 3 razy), *Physical Review B* (IF=3.575; 2 razy), *Journal of Materials Science* (IF=3,553; 2 razy) czy *Materials Chemistry and Physics* (IF=3.408; 1 raz). Sześć pozycji jest monoautorskich, a pozostałe Habilitant opublikował wraz z współautorami wśród których powtarzają się zwłaszcza prof. dr hab. A. Jezierski i dr hab. M. Pugaczowa-Michalska z macierzystego Instytutu Fizyki Molekularnej w Poznaniu. Całkowita liczba cytowań według *Web of Science* wynosi 197 (odliczając autocytowania) a współczynnik Hirscha 9 (8 w momencie składania wniosku).

Na dorobek konferencyjny Habilitanta składają się 4 prezentacje ustne (3 na konferencjach o zasięgu międzynarodowym) i 28 posterowych.

Dr Kaczkowski był wykonawcą w dwóch grantach krajowych (w tym jednym promotorskim) oraz kierownikiem projektu w jednym.

Podsumowując można stwierdzić, że dorobek naukowy dr. Jakuba Kaczkowskiego nie budzi zastrzeżeń i uzasadnia staranie o nadanie tytułu doktora habilitowanego.

### **Ocena prac stanowiących osiągnięcie naukowe będące podstawą wniosku**

Jako osiągnięcie naukowe, wspomniane w art. 16 ust. 2 „Ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki” z dnia 14 marca 2003 roku (Dz. U. 2016 r. poz. 882 ze zm. w Dz. U. Z 2016 r. poz. 1311.), Habilitant przedstawił zbiór 8 publikacji pt. „Wybrane właściwości związków bizmutu na bazie tlenków metali – obliczenia za pomocą teorii funkcjonału gęstości”. Zbiór uzupełniony został liczącym 45 stron przewodnikiem. Wszystkie prace opublikowane zostały w czasopismach o zasięgu międzynarodowym, o Impact Factorze wynoszącym średnio  $IF=2,4$  ( $2,7$  przy odrzuceniu najniższej wartości). Omawiane prace zgromadziły do dnia dzisiejszego 26 cytowań (nie licząc autocytowań autorów), co należy uznać za wynik co najmniej dobry zważywszy, że pochodzą one z lat 2014-2018. Na uwagę zasługuje fakt, że połowa prac ze zbioru (cztery) jest autorstwa wyłącznie dr. Kaczkowskiego. Również oświadczenia współautorów co do ich udziału w pozostałych publikacjach potwierdzają znaczący wkład Habilitanta. Od strony parametrycznej nie ma więc wątpliwości, że przedstawione przez autora osiągnięcie naukowe spełnia ustawowe i zwyczajowe kryteria.

Wszystkie prace ze zbioru poświęcone są badaniu związków bizmutu wykazujących własności piezo- i ferroelektryczne. Piezo- i Ferroelektryki znajdują liczne zastosowania, zarówno w urządzeniach codziennego użytku jak i specjalistycznych (urządzenia USG, myjki ultradźwiękowe, sonary, etykiety RFID etc.). Dla przykładu wartość światowego zapotrzebowania na piezoelektryki w 2015 roku szacowana była na 21,6 miliardów dolarów, a w przypadku ferroelektryków 440 milionów USD (rok 2019). Jednocześnie najczęściej współcześnie stosowane materiały, takie jak PZT ( $Pb[Zr_xTi_{1-x}]O_3$ ) zawierają ołów, a w związku z tym są toksyczne dla ludzi i szkodliwe dla środowiska. Poszukiwanie nowych piezo- i ferroelektrycznych materiałów jest więc zagadnieniem niezwykle istotnym. Wśród potencjalnych zamienników obecnie stosowanych, zawierających ołów,

związków często wymienia się badane przez Habilitanta związki bizmutu, w szczególności te opisane formułą  $\text{BiMO}_3$  (M - metal). Wynika to z faktu posiadania przez jony  $\text{Bi}^{3+}$  tzw. wolnej pary elektronowej, której obecność może prowadzić do dystorsji sieci krystalicznej i w konsekwencji pojawienia się polaryzacji ferroelektrycznej. W chwili obecnej parametry tych związków, takie jak wspomniana polaryzacja ciągle ustępują ołowiowym pierwowzorom. Niezadowolający jest też stopień zgodności teorii i eksperymentu, co motywuje do dalszych dociekań teoretycznych. Podsumowując, nie ulega wątpliwości że wybrana przez dr. Kaczkowskiego tematyka jest ważna i interesująca, tak w sensie poznawczym jak i ze względów praktycznych.

Wszystkie omawiane prace mają charakter teoretyczny i omawiają wyniki obliczeń tzw. metodami z pierwszych zasad (*ab initio*), opartymi o teorię funkcjonału gęstości (Density Functional Theory - DFT). Autor nie ogranicza się przy tym do podstawowych przybliżeń tej teorii, tj. funkcjonałów wymiennych LDA i GGA, ale sięga po warianty pozwalające uwzględnić efekty korelacyjne, zaczynając od najprostszego LDA+U, poprzez efektywny funkcjonał Trana-Blahy (TM-mBJ) aż po wysoce dokładne ale wymagające obliczeniowo funkcjonały hybrydowe (HSE). Jest to o tyle istotne, że większość wcześniejszych prac wykonana była na poziomie podstawowych przybliżeń, co może być odpowiedzialne za rozbieżność wyników teoretycznych i doświadczalnych. Warto też zaznaczyć, że przeprowadzone przez Autora obliczenia były bardzo wymagające, co wynika zarówno ze stosowania wspomnianych wyżej funkcjonałów hybrydowych, jak i z dużej, bo sięgającej 40, ilości atomów w (super) komórce elementarnej. Obliczenia prowadzone były głównie dostępnym komercyjnie programem VASP.

Zamieszczane skrupulatnie przez Autora porównania wyników otrzymanych przy użyciu wspomnianych funkcjonałów, stanowi pewną wartość dodaną w omawianych pracach, jest bowiem użyteczną wskazówką dla innych autorów co do tego jakie przybliżenie będzie efektywne w dla omawianej grupy materiałów. Pewien niedosyt budzi nieco machinalny, pozbawiony fizycznego komentarza, charakter tych porównań. Trzeba jednak zauważyć, że jest to sytuacja dość typowa i w pewnej mierze nieunikniona ze względu na dużą złożoność stosowanych metod obliczeniowych (efekt „czarnej skrzynki”), np. wartość parametru "U" w metodzie LDA+U rutynowo traktuje się jako parametr empiryczny.

Poza standardowymi wynikami dotyczącymi struktury elektronowej, takimi jak gęstość stanów (DOS), Habilitant sięga także po dodatkowe narzędzia takie jak elektronowa funkcja lokalizacji (Electron Localization Function - ELF), pozwalająca na wizualizację i określenie położenia

swobodnej par elektronowej. Oprócz struktury elektronowej, część artykułów zawiera również obliczenia widm fononowych oraz ich analizę w kontekście stabilności strukturalnej i ew. przejścia od fazy para- do ferroelektrycznej (miękkie fonony -- soft modes).

Spośród wyników przedstawionych w omawianym cyklu publikacji, za najważniejsze i najciekawsze uznać można:

- uzyskanie poprawnego obrazu struktury elektronowej (wartość przerwy energetycznej) związku  $\text{BiGaO}_3$  możliwe dzięki zastosowaniu funkcjonałów hybrydowych (praca [H1]), wyjaśnienie dlaczego obecność na bizmucie par elektronowych dla fazy piroksenowej (Pcca) nie prowadzi do pojawienia się uporządkowania ferroelektrycznego.
- zbadanie, również dla  $\text{BiGaO}_3$ , własności strukturalnych w funkcji ciśnienia hydrostatycznego (praca [H5]). Uzyskano przy tym dobrą zgodność z eksperymentem dla pierwszego z przejść z fazy rombowej do jednoskośnej, przy ciśnieniu 3,5 GPa. Dla kolejnych przejść fazowych uzyskano częściową korelację z doświadczeniem. Powyżej ciśnienia pierwszego przejścia fazowego układ staje się ferroelektryczny, a w okolicach 5 GPa możliwe jest współistnienie trzech faz polarnych. Wyniki te sugerują, że przy zastosowaniu odpowiedniego domieszkowania, tj. zastępując ciśnienie hydrostatyczne, ciśnieniem chemicznym w roztworach stałych, możliwe jest uzyskanie układu ferroelektrycznego w warunkach normalnych. Otwiera to drogę do otrzymania poszukiwanego zamiennika zawierającego ołów związku PZT.
- wykazanie, że związek  $\text{BiAlO}_3$  jest, wbrew wcześniejszym wynikom teoretycznym, stabilny strukturalnie, co było możliwe dzięki zastosowaniu bardziej zaawansowanych przybliżeń (funkcjonałów wymiennych). Dyskusja, w oparciu o widma fononowe, możliwych przyczyn rozbieżności między teorią a doświadczeniem, wskazująca na obecność luk bizmutowych w próbkach doświadczalnych.
- pokazanie, że domieszkowanie multiferroika  $\text{BiFeO}_3$  atomami ziem rzadkich obniża, dla niewielkich koncentracji domieszek, polaryzacja ferroelektryczna jest tylko nieznacznie mniejsza niż dla wyjściowego związku. Jest to istotne w kontekście doświadczalnym gdyż takie zmniejsza prądy upływu, które powodujące obniżenie polaryzacji mierzonej w próbkach doświadczalnych (praca [H3]).
- wykazanie możliwości współistnienia dla roztworów stałych  $\text{Bi}_{1-x}\text{RE}_x\text{FeO}_3$  (RE - zmienia rzadka) faz ferro- i para elektrycznych, co stwarza możliwość kontroli stanu polaryzacyjnego próbki za pomocą pola elektrycznego (praca [H3]).

- analiza dwóch mechanizmów poprawy własności ferroelektrycznych  $\text{BiFeO}_3$  przy domieszkowaniu Itrem (Y) (praca [H8])
- zbadanie struktury elektronowej i efektów domieszkowania w przypadku nie badanego wcześniej teoretycznie związku o mieszanej walencyjności --  $\text{BiPd}_2\text{O}_4$

Podsumowując, uważam że przedstawione przez dr Jakuba Kaczkowskiego osiągnięcie naukowe spełnia sformułowany w Ustawie wymóg bycia „znaczącym wkładem autora w rozwój określonej dyscypliny naukowej”.

### **Działalność dydaktyczna**

Habilitant prowadził, jako jeden z trzech wykładowców, wykład semestralny (semestr letni 2017/2018) dla doktorantów Studium Doktoranckiego IFM PAN, pt.: „Korelacje elektronowe i modelowanie układów w skali atomowej”. Skromny dorobek dydaktyczny jest w pewnym stopniu zrozumiały ze względu na specyfikę pracy w instytucie badawczym, gdzie nie prowadzi się dydaktyki dla studentów studiów I czy II stopnia.

### **Ocena końcowa wniosku**

Moim zdaniem przedstawiony do recenzji wniosek, a w szczególności dorobek naukowy, spełniają kryteria przewidziane w „Ustawie o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki” z dnia 14 marca 2003 roku (Dz. U. 2016 r. poz. 882 ze zm. w Dz. U. Z 2016 r. poz. 1311.). Nie ulega dla mnie wątpliwości, że dr Jakub Kaczkowski jest naukowcem dojrzałym i w pełni samodzielnym. Świadczy o tym samodzielny wybór interesującej i ważnej tematyki badawczej, jak i poziom prowadzonych w jej obszarze badań. Osiągane wyniki publikowane są, niekiedy również samodzielnie, w dobrych i bardzo dobrych czasopismach o międzynarodowym zasięgu. Należy również zauważyć zdolność do pozyskiwania projektów badawczych (własny grant) i finansowania tą drogą własnego zaplecza badawczego (zakup serwerów obliczeniowych). Mając powyższe na uwadze, wnioskuję o dopuszczenie dr. inż. Jakuba Kaczkowskiego do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

Z poważaniem



dr hab. Maciej Zwierzycki