



Wydział Fizyki Politechniki Warszawskiej
ul. Koszykowa 75, 00-662 Warszawa
(nazwa i dane adresowe podmiotu habilitującego,
wybranego do przeprowadzenia postępowania)
za pośrednictwem:

Rady Doskonałości Naukowej

pl. Defilad 1
00-901 Warszawa
(Pałac Kultury i Nauki, p. XXIV, pok. 2401)

Krzysztof Piotr Zberecki
(imię i nazwisko wnioskodawcy)

Wydział Fizyki Politechniki Warszawskiej
ul. Koszykowa 75, 00-662 Warszawa
Zakład V Badań Strukturalnych
(miejsce pracy/jednostka naukowa)

Wniosek

z dnia 19 września 2023

o przeprowadzenie postępowania w sprawie nadania stopnia doktora
habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie¹ nauki
fizyczne

Określenie osiągnięcia naukowego będącego podstawą ubiegania się o nadanie stopnia
doktora habilitowanego

Poszukiwanie struktur niskowymiarowych o optymalnych własnościach termoelektrycznych

Wnioskuje – na podstawie art. 221 ust. 10 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie
wyższym i nauce (Dz. U. z 2021 r. poz. 478 zm.) – aby komisja habilitacyjna podejmowała
uchwałę w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w głosowaniu **tajnym/jawnym**^{*2}

Zostałem poinformowany, że:

*Administratorem w odniesieniu do danych osobowych pozyskanych w ramach postępowania w
sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego jest Przewodniczący Rady Doskonałości
Naukowej z siedzibą w Warszawie (pl. Defilad 1, XXIV piętro, 00-901 Warszawa).*

*Kontakt za pośrednictwem e-mail: kancelaria@rdn.gov.pl , tel. 22 656 60 98 lub w siedzibie
organu. Dane osobowe będą przetwarzane w oparciu o przesłankę wskazaną w art. 6 ust. 1 lit. c)
Rozporządzenia UE 2016/679 z dnia z dnia 27 kwietnia 2016 r. w związku z art. 220 - 221 oraz
art.*

*232 – 240 ustawy z dnia 20 lipca 2018 roku - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, w celu
przeprowadzenie postępowania o nadanie stopnia doktora habilitowanego oraz realizacji praw i
obowiązków oraz środków odwoławczych przewidzianych w tym postępowaniu.*

*Szczegółowa informacja na temat przetwarzania danych osobowych w postępowaniu dostępna jest
na stronie www.rdn.gov.pl/klauzula-informacyjna-rodz.html*

¹ Klasyfikacja dziedzin i dyscyplin wg. rozporządzenia Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 20 września 2018 r. w sprawie dziedzin nauki i dyscyplin naukowych oraz dyscyplin w zakresie sztuki (Dz. U. z 2018 r. poz. 1818).

² * Niepotrzebne skreślić.

Krzysztof Zberecki

.....
(podpis wnioskodawcy)

Załączniki:

Załącznik 1: Dane wnioskodawcy

Załącznik 2: Odpis dyplomu doktorskiego

Załącznik 3: Autoreferat

Załącznik 4: Wykaz osiągnięć naukowych

Autoreferat habilitacyjny w języku polskim

1. Imię i nazwisko

Krzysztof Piotr Zberecki (Nr ORCID: 0000-0001-6523-739X)

2. Posiadane dyplomy i stopnie naukowe

Stopień doktora inżyniera nauk fizycznych nadany przez Wydział Fizyki Politechniki Warszawskiej w 2007 roku. Tytuł rozprawy: „Korelacje oktopolowe w jądrach atomowych”, przygotowanej pod kierunkiem prof. dr hab. inż. Piotra Magierskiego.

Stopień magistra inżyniera nauk fizycznych nadany przez Wydział Fizyki Politechniki Warszawskiej w 2002 roku. Tytuł pracy: „Korelacje cząstek nieidentycznych w eksperymencie STAR”, przygotowanej pod kierunkiem prof. nzw. dr hab. Jana Pluty.

Dyplom ukończenia studiów podyplomowych „Zarządzanie projektami” w Szkole Głównej Handlowej w Warszawie (2010 r.).

3. Informacja o dotychczasowym zatrudnieniu

Od 15 lutego 2008 roku do chwili obecnej jako adiunkt naukowo – dydaktyczny na Wydziale Fizyki Politechniki Warszawskiej.

4. Osiągnięcie naukowe stanowiące podstawę postępowania habilitacyjnego

Jako osiągnięcie naukowe stanowiące podstawę postępowania habilitacyjnego, w rozumieniu art. 16 ust. 2 ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym, z dnia 14 marca 2003 r. (Dziennik Ustaw 2016 r. poz. 882 ze zmianą w Dzienniku Ustaw 2016 r. poz. 1311) przedstawiam poniższy cykl dwunastu publikacji i jednej monografii pod wspólnym tytułem:

Poszukiwanie struktur niskowymiarowych o optymalnych własnościach termoelektrycznych.

Publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego:

H.1 K. Zberecki, M. Wierzbicki, J. Barnaś, and R. Swirkowicz, „Thermoelectric effects in silicene nanoribbons”, Physica Review B 88, 115404 (2013), IF = 3.91

- H.2 K. Zborecki**, R. Swirkowicz, and J. Barnaś, „Spin effects in thermoelectric properties of Al- and P-doped zigzag silicene nanoribbons”, *Physica Review B*, 89, 165419 (2014), IF = 3.91
- H.3 K. Zborecki**, R. Swirkowicz, M. Wierzbicki and J. Barnaś, „Enhanced thermoelectric efficiency in ferromagnetic silicene nanoribbons terminated with hydrogen atoms”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2014, 16, 12900, IF = 3.3
- H.4 K. Zborecki**, R. Swirkowicz, J. Barnaś, „Thermoelectric properties of zigzag silicene nanoribbons doped with Co impurity atoms”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 393 (2015) 305–309, IF = 3.09
- H.5 K. Zborecki**, R. Swirkowicz, J. Barnaś, „Thermoelectric Properties of Doped Zigzag Silicene Nanoribbons”, *Acta Physica Polonica A* 127, 2015 (Proceedings of the European Conference Physics of Magnetism, Poznań 2014), IF = 0.54
- H.6 K. Zborecki**, R. Swirkowicz, M. Wierzbicki and J. Barnaś, „Spin effects in thermoelectric phenomena in SiC nanoribbons”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2015, 17, 1925, , IF = 3.3
- H.7 K. Zborecki**, R. Swirkowicz and J. Barnaś, „Boron nitride zigzag nanoribbons: optimal thermoelectric systems”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2015, 17, 22448, IF = 3.3
- H.8 K. Zborecki**, R. Swirkowicz, M. Wierzbicki and J. Barnaś, „Spectacular enhancement of thermoelectric phenomena in chemically synthesized graphene nanoribbons with substitution atoms”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2016, 18, 18246, IF = 3.3
- H.9 K. Zborecki** and R. Swirkowicz, „Thermoelectric phenomena in chemically synthesized graphene nanoribbons with substitution atoms and functional groups”, *Physica Status Solidi B* 253, No. 12, 2523–2527 (2016) , IF = 1.78
- H.10 K Zborecki**, M. Wierzbicki, R. Swirkowicz and J. Barnaś, „Unique magnetic and thermoelectric properties of chemically functionalized narrow carbon polymers”, *Journal of Physics: Condensed Matter* 29 (2017) 045303, IF = 2.7
- H.11 K. Zborecki** and R. Swirkowicz, „Transport and thermoelectric properties of magnetic organic chains”, *Physica Status Solidi B* 254, No. 7, 1600783 (2017), IF = 1.78
- H.12 K. Zborecki** and R. Swirkowicz, „Transport and Thermoelectric Properties of Magnetic Organic Structures”, *Acta Physica Polonica A* 133, 3 (Proceedings of the European Conference Physics of Magnetism, Poznań 2018) , IF=0.54
- H.13 K. Zborecki**, „Silicene nanoribbons”, rozdział w monografii „Silicon Nanomaterials Sourcebook”, K. Sattler (edytor), CRC Press 2018, ISBN-13: 978-1498763776

Szczegółowy opis wyników badawczych

Wstęp

Właściwości termoelektryczne układów nanoskopowych wzbudzają aktualnie duże zainteresowanie ze względu na możliwość konwersji ciepła na energię elektryczną, co jest bardzo istotne z punktu widzenia zastosowań w mikro- i nanoelektronice. Efekty ograniczenia kwantowego oraz blokady transportowej mogą prowadzić do znacznego zwiększenia wydajności termoelektrycznej w tych strukturach. Z punktu widzenia zastosowania w przyszłych urządzeniach spintronicznych, badanie

wzajemnego oddziaływanie efektów spinowych oraz właściwości termoelektrycznych w nanoukładach również odgrywa coraz większą rolę (jest to domena tzw. kalorytroniki spinowej). Studia nad zjawiskami termoelektrycznymi, zarówno w materiałach niskowymiarowych jak i masywnych (ang. *bulk*) są dziedziną stale się rozwijającą. Np. wg bazy Scopus liczba prac ze słowem kluczowym „*thermoelectric*” w tytule wzrosła z 1400 opublikowanych w roku 2012 do prawie 3000 opublikowanych w roku 2022.

Dwa zjawiska fizyczne odgrywają tu najważniejszą rolę. Są nimi konwencjonalny oraz spinowy efekt Seebecka. W przypadku konwencjonalnym, efekt ten polega na generowaniu prądu elektrycznego w układzie z gradientem temperatury. W przypadku spinowym, termicznie generowany jest prąd spinowy. Współczynnik Seebecka lub termosila (ang. *thermopower*) wyznacza wielkość napięcia indukowanego przez różnicę temperatur na brzegach złącza, $S = \frac{\Delta V}{\Delta T}$. Można go wyrazić jako $S = -\frac{1}{T} \frac{L^{(12)}}{L^{(11)}}$ poprzez całki zawierające funkcje korelacyjne:

$$\begin{aligned} L^{11} &= \frac{k_B T}{3i\omega\nu} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega\tau} \langle T_\tau \vec{j}(\tau) \cdot \vec{j}(0) \rangle \\ L^{12} &= \frac{k_B T}{3i\omega\nu} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega\tau} \langle T_\tau \vec{j}_Q(\tau) \cdot \vec{j}(0) \rangle \end{aligned} \quad (1)$$

gdzie, odpowiednio, $\vec{j}(t)$ i $\vec{j}_Q(t)$ są prądem elektrycznym i cieplnym [Mah00].

W przybliżeniu odpowiedzi liniowej, związek prądu elektrycznego i cieplnego z ΔV i ΔT można zapisać jako:

$$\begin{pmatrix} I \\ I_Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^2 L_0 & \frac{e}{T} L_1 \\ e L_1 & \frac{1}{T} L_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta V \\ \Delta T \end{pmatrix}, \quad (2)$$

gdzie $L_n = -\frac{1}{h} \int dE T(E) (E - \mu)^n \frac{\partial f}{\partial E}$. Za pomocą całek (tzw. „momentów”) L_n można wyrazić istotne wielkości, charakteryzujące właściwości transportowe i termoelektryczne nanoukładów.

Współczynnik Seebecka jest wtedy zdefiniowany jako $S = -\frac{L_1}{|e|TL_0}$. Konduktancję elektryczną

można natomiast wyrazić jako $G = e^2 L_0$. Konduktancja termiczna jest sumą wkładów, pochodzących od elektronowych i fononowych stopni swobody, $\kappa = \kappa_e + \kappa_{ph}$. Wkład elektronowy do konduktancji

termicznej jest zdefiniowany (dla $I = 0$) jako $\kappa_e = \frac{1}{T} \left(L_2 - \frac{L_1^2}{L_0} \right)$, gdzie T oznacza temperaturę.

Wkład fononowy można oszacować, analizując widmo dyspersji fononów dla konkretnego nanoukładu. Wydajność termoelektryczną nanostruktury określa się wyznaczając tzw. współczynnik

ZT (po ang. zwany *figure of merit*), zdefiniowany jako $ZT = \frac{S^2 G T}{\kappa}$. W przypadku układów

spinowo-spolaryzowanych należy rozszerzyć powyższe definicję, aby uwzględnić spinowy efekt Seebecka. Macierz (2) ma teraz postać:

$$\begin{pmatrix} I \\ I_s \\ I_Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^2 L_0^+ & e^2 L_0^- & \frac{e}{T} L_1^+ \\ e^2 L_0^- & e^2 L_0^+ & \frac{e}{T} L_1^- \\ e L_1^+ & e L_1^- & \frac{1}{T} L_2^+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta V \\ \Delta V_s \\ \Delta T \end{pmatrix}, \quad (3)$$

gdzie I_s i ΔV_s są, odpowiednio, prądem spinowym oraz różnicą napięć spinowych. Momenty są teraz zależne od indeksu spinowego, $L_n \rightarrow L_{n\sigma} = -\frac{1}{h} \int dE T_\sigma(E) (E - \mu)^n \frac{\partial f}{\partial E}$ a $L_n^\pm = L_{n\uparrow} \pm L_{n\downarrow}$. Za ich pomocą definiuje się konwencjonalne oraz spinowe współczynniki Seebecka

$$\begin{aligned} S_c &= -\frac{1}{2|e|T} (L_{1\uparrow}/L_{0\uparrow} + L_{1\downarrow}/L_{0\downarrow}) \equiv \frac{1}{2} (S_{c\uparrow} + S_{c\downarrow}), \\ S_s &= -\frac{1}{2|e|T} (L_{1\uparrow}/L_{0\uparrow} - L_{1\downarrow}/L_{0\downarrow}) \equiv \frac{1}{2} (S_{c\uparrow} - S_{c\downarrow}). \end{aligned} \quad (4)$$

oraz odpowiednie współczynniki, ZT :

$$\begin{aligned} ZT_c &= \frac{S_c^2 G T}{\kappa}, \\ ZT_s &= \frac{S_s^2 |G_s| T}{\kappa}, \end{aligned} \quad (5)$$

gdzie G i G_s to, odpowiednio, elektryczna i spinowa konduktancja.

W przypadku opisu zjawisk transportu w nanostrukturach podłączonych do dwóch elektrod (rezewuarów), można zastosować znane od lat 50-tych XX wieku podejście Landauera [Lan57]:

$$I = \frac{e}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) [f_1(E) - f_2(E)] dE, \quad (6)$$

gdzie $T(E)$ jest współczynnikiem (funkcją) transmisji a $f_1(E)$ i $f_2(E)$ są funkcjami rozkładu Fermiego-Diraca elektronów w rezerwarach. Z definicji momentów $L_{n\sigma}$ oraz powyższego wzoru widać, że kluczową wielkością, jaką należy znać dla danego nanoukładu jest funkcja transmisji $T(E)$. Dla podejścia teoretycznego opartego na metodach obliczeniowych typu *ab-initio*, $T(E)$ wyznaczane jest metodą nierównowagowych funkcji Greena (NEGF).

Właściwości termoelektryczne materiałów były badane od dziesiątek lat. Jednakże dopiero pojawienie się nowych, nisko-wymiarowych materiałów, takich jak grafen, zaowocowało znacznym zwiększeniem wydajności efektów termoelektrycznych (choć czysty grafen ma bardzo niską wydajność termoelektryczną ($ZT \sim 10^{-3}$), można ją zwiększyć np. poprzez odpowiedni układ domieszek [Anno2017] do ZT rzędu 1). Efekty wymiarowe są kluczowe ze względu na możliwości optymalizacji materiału pod względem właściwości termoelektrycznych. Materiały jednowymiarowe (1D) są

znacznie bardziej wydajne niż 2D i 3D ze względu na postać funkcji rozkładu kanałów przewodzących [Kim09].

W swoich badaniach zająłem się głównie wąskimi (rzędu kilku-kilkunastu atomów) paskami materiałów dwuwymiarowych z rodziny grafenu (silicen, BN, SiC) oraz podobnymi do nich polimerami węglowymi. Głównym celem było znalezienie takich nanoukładów, które charakteryzowałyby się maksymalną wartością współczynników $ZT_{c/s}$ oraz korzystną charakterystyką funkcji $S_{c/s}$. W celu optymalizacji właściwości termoelektrycznych ww. układy były modyfikowane poprzez dodawanie domieszek (zarówno magnetycznych jak i niemagnetycznych) oraz grup funkcyjnych.

Oczywiście istnieje wiele alternatyw dla ww. materiałów potencjalnie posiadających korzystne właściwości termoelektryczne. W swoim wyborze kierowałem się kryteriami przedstawionymi w następnym punkcie.

Metodologia i wybór materiałów

Badania miały charakter ściśle teoretyczny. Wykorzystałem w nich szereg ogólnodostępnych kodów numerycznych (jak np. pakiety programów Siesta [San97] czy Quantum Espresso [Gia17]) implementujących teorię funkcjonału gęstości (DFT) oraz nierównowagowych funkcji Greena. Narzędzia te pozwoliły na optymalizację struktury, obliczenia właściwości energetycznych i magnetycznych, a także wyznaczenie funkcji transmisji $T(E)$. Aby otrzymać $T(E)$ zastosowano geometrie układu zaprezentowaną na Rys. 1. Struktura jednowymiarowa, dla której przeprowadzane są obliczenia jest dzielona na trzy obszary – lewej i prawej elektrody (L oraz R na schemacie z Rys. 1) oraz obszar urządzenia (D jak *device*). Obszary L i R są nieskończone w, odpowiednio lewym i prawym kierunku, ich wpływ na obszar D jest wyznaczany za pomocą tzw. energii własnych (*self energy*) – Σ_L oraz Σ_R . Transmisja jest obliczana ze wzoru $T(E) = Tr[t^\dagger t]$, gdzie

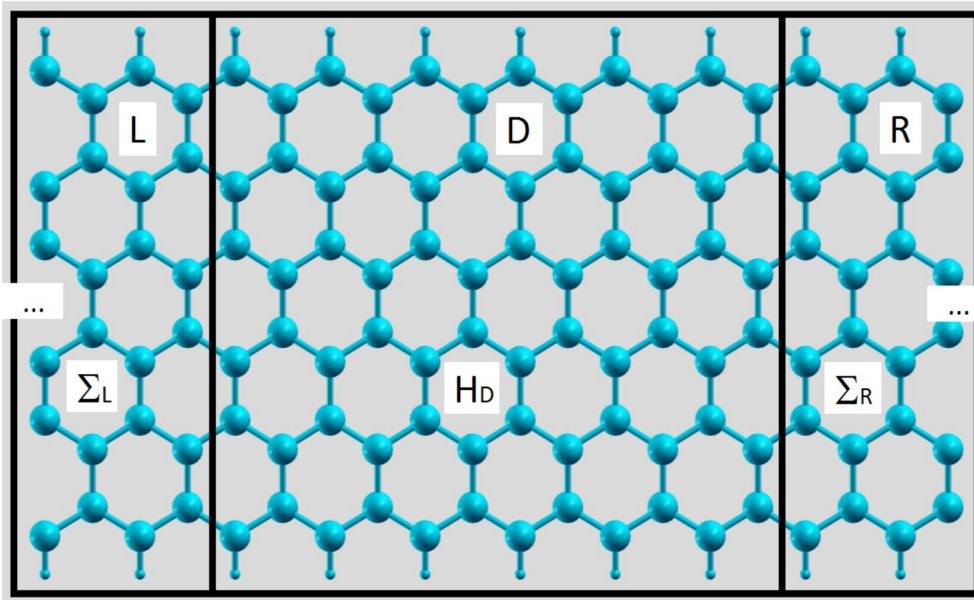
$$t(E) = (Im[\Sigma_R(E)])^{1/2} G(E) (Im[\Sigma_L(E)])^{1/2} \quad (7)$$

Funkcja Greena w powyższym wzorze jest obliczana dla obszaru D, opisanego (skończonym) hamiltonianem H_D .

Do analizy wyników oraz wyznaczania na podstawie funkcji transmisji elektronowej właściwości termoelektrycznych użyłem kodów własnego autorstwa. Pozwoliło to wyznaczyć teoretycznie szereg wielkości fizycznych, wspomnianych wyżej charakteryzujących badane materiały (G_σ , $S_{c/s}$, κ , $ZT_{c/s}$). Szerokość pasków (z ang. *nanoribbonów*) definiuje się poprzez podanie ilości atomów w pojedynczym rzędzie, np. pasek na Rys. 1 ma szerokość $N=6$ (sześć atomów Si w rzędzie). W swoich pracach badałem paski o szerokości $N=6-12$.

Inną kwestią był wybór struktur dla których przeprowadzano obliczenia. Pierwszym wyborem był silicen, gdyż był to materiał podobny do grafenu, będący w czasie rozpoczęcia jednym z głównych alternatyw do struktur węglowych. Podczas badania grafenu okazało się, że korzystnym ze względu na potencjalnie interesujące właściwości termoelektryczne jest sytuacja, w której wąskie paski danego

materiału posiadają (w konfiguracji zygzakowej) wąską przerwę energetyczną. Dlatego kolejnymi materiałami, jakimi się zająłem, były azotek boru (BN) i węgiel krzemu (SiC). Mają też one stosunkowo dużą wartość energii wiązania (z obliczeń DFT wynosi ona odpowiednio 8.83 eV/atom i 7.63 eV/atom dla BN i SiC dla struktur 2D [Sah09]), co daje szansę na stabilność struktur jednowymiarowych. Z tego powodu nie zdecydowałem się na badanie germanenu i stanenu a także dalszych hipotetycznych materiałów postulowanych w pracy [Sah09]. Zamiast tego postanowiłem się zająć strukturami istniejącymi, jakimi są otrzymane w 2009 roku nowe struktury węglowe oraz, otrzymane jeszcze wcześniej (lata 90-te XX wieku) polimery węglowe. Są one stabilne energetycznie oraz modularne, dzięki czemu potencjalnie łatwo jest wprowadzić korzystne modyfikacje.



Rys.1 Przykładowa geometria układu przyjęta w obliczeniach dla silicenu. Trzy kropki oznaczają nieskończoność elektrod w danym kierunku.

Omówienie wyników badawczych

Silicen, prace H.1-H5

W pracy H.1 zbadano efekty termoelektryczne w wąskich paskach silicenu (krzemowy analog grafenu) o brzegach zygzakowych. W przeciwieństwie do tzw. brzegów fotelowych (ang. *armchair*, w analogii do budowy nanorurek) na brzegach zygzakowych obecne są zlokalizowane momenty magnetyczne (wynoszące ok. $0.5 \mu_B/\text{atom}$). Możliwe są zatem dwie konfiguracje magnetyczne w zależności od ułożenia momentów na obu brzegach – ferro (FM) i antyferromagnetyczna (AFM). Główne wyniki pracy są następujące:

1. Pokazano, że stanem podstawowym pasków (niezależnie od szerokości) jest stan AFM z niezerową przerwą energetyczną. Stan FM (metaliczny) leży wyżej o 0.05 eV, dzięki czemu można użyć zewnętrznego pola magnetycznego do stabilizacji stanu FM.

2. Wyznaczono magnetoopór (ang. *magnetoresistance*, $MR = \frac{G_{FM} - G_{AFM}}{G_{FM} + G_{AFM}}$) oraz magnetotermosiłę (ang. *magnetothermopower*, $MTP = \frac{S_{FM} - S_{AFM}}{|S_{FM}| - |S_{AFM}|}$) w funkcji potencjału chemicznego μ .

Otrzymane wyniki pokazały, że:

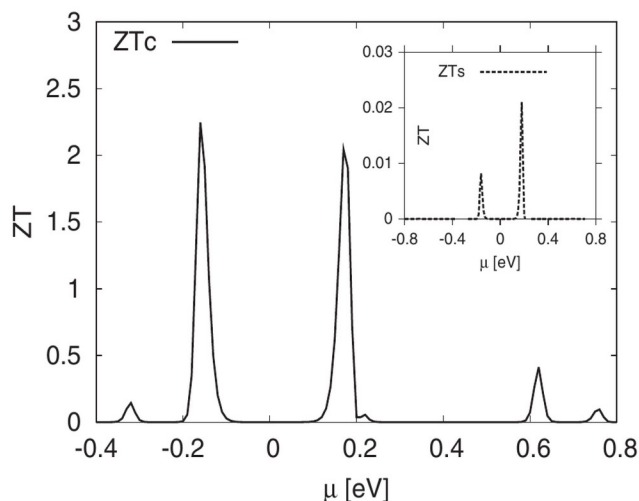
2a. Dla niewielkiego domieszkowania typu *p* lub *n* (okolice poziomu Fermiego, E_F) MR przyjmuje stałą wartość równą 1. W dalszych odległościach od E_F (± 0.2 eV) MR przyjmuje wartości ujemne. Dowodzi to, że wąskie paski silicenowe mogą być wartościowym elementem spintronicznym.

2b. Podobnie wygląda przebieg funkcji MTP, dzięki czemu *nanoribbony* silicenowe pozwalają na relatywnie łatwą zmianę ich właściwości termoelektrycznych generowanych gradientem temperatury.

3. Wyznaczono konwencjonalny oraz spinowy współczynnik Seebecka w funkcji potencjału chemicznego dla różnych temperatur (w zakresie 100-300K). Otrzymane zależności $S_{s/c}$ od μ z szerokimi pikami w odległości ± 0.1 eV od E_F o wartości ok. $1200 \mu V/K$. Co ciekawe, piki te są właściwie równe co do wartości dla obu współczynników, co sprawia, że paski silicenowe są przypadkiem unikalnym, gdyż zwykle S_c w układach spinowo-spolaryzowanych jest większe od S_s .

4. Wyznaczono wydajności termoelektryczne ($ZT_{c/s}$) włącznie z wpływem na nią efektów fononowych (Rys. 2). Konwencjonalna wydajność okazała się być o rząd wielkości wyższa niż w przypadku grafenu. Współczynnik κ_{ph} został wyznaczony za pomocą modelu 4NNNF (autorstwa dr hab. M. Wierzbickiego), którego parametry zostały dobrane do obliczeń *ab-initio*.

W momencie publikacji pracy istniało kilka studiów dotyczących właściwości termoelektrycznych w wąskich paskach grafenu oraz tylko jedna dotycząca silicenu, dzięki czemu opublikowane wyniki spotkały się z zainteresowaniem wyrażonym w liczbie cytowań równej 114.

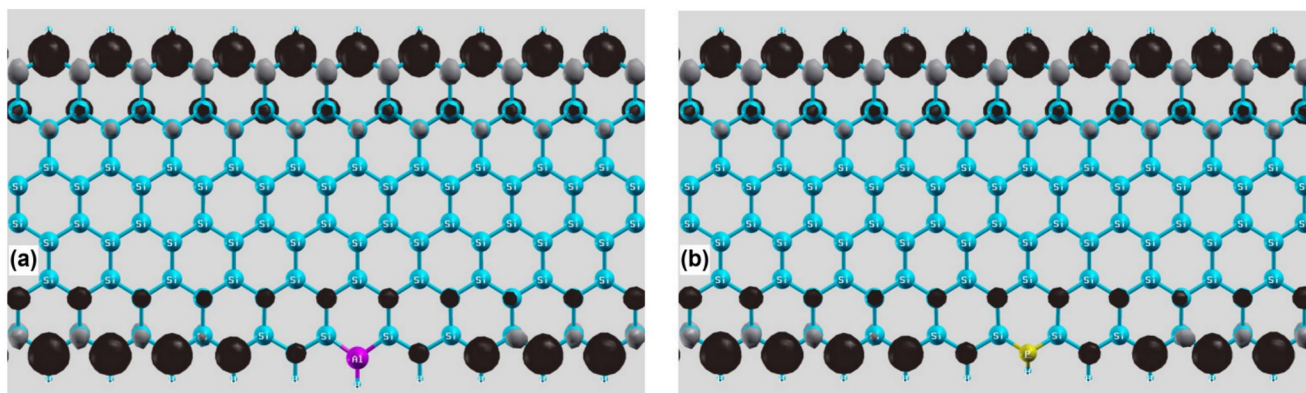


Rys. 2 ZT_c oraz ZT_s (inset) dla konfiguracji FM momentów magnetycznych na brzegach paska. Temperatura $T=90K$ (z pracy [H.1]).

Praca H.2 jest kontynuacją badań nad siliceniem, rozpoczętych w pracy H.1. W tym przypadku badano wpływ domieszkowania *nanoribbonów* silicenowych pojedynczymi atomami fosforu (P) i glinu (Al) na właściwości magnetyczne i termoelektryczne tych struktur. W szczególności, bardziej istotny okazał się wpływ położenia atomu domieszki (brzeg paska lub środek) niż jej rodzaj (Al czy P).

Główne wyniki pracy są następujące:

1. Pokazano, że najbardziej stabilna energetycznie jest sytuacja, w której atom domieszki położony jest na brzegu paska. Stan podstawowy w takiej sytuacji jest stanem o niewielkim całkowitym momencie magnetycznym (porządek ferrimagnetyczny) z przerwą energetyczną. Konkretnie, kierunki momentów na brzegach są ułożone przeciwnie, natomiast ich wartości w najbliższym otoczeniu domieszki zbiegają do zera, więc cała struktura posiada niewielki moment magnetyczny (Rys. 3).



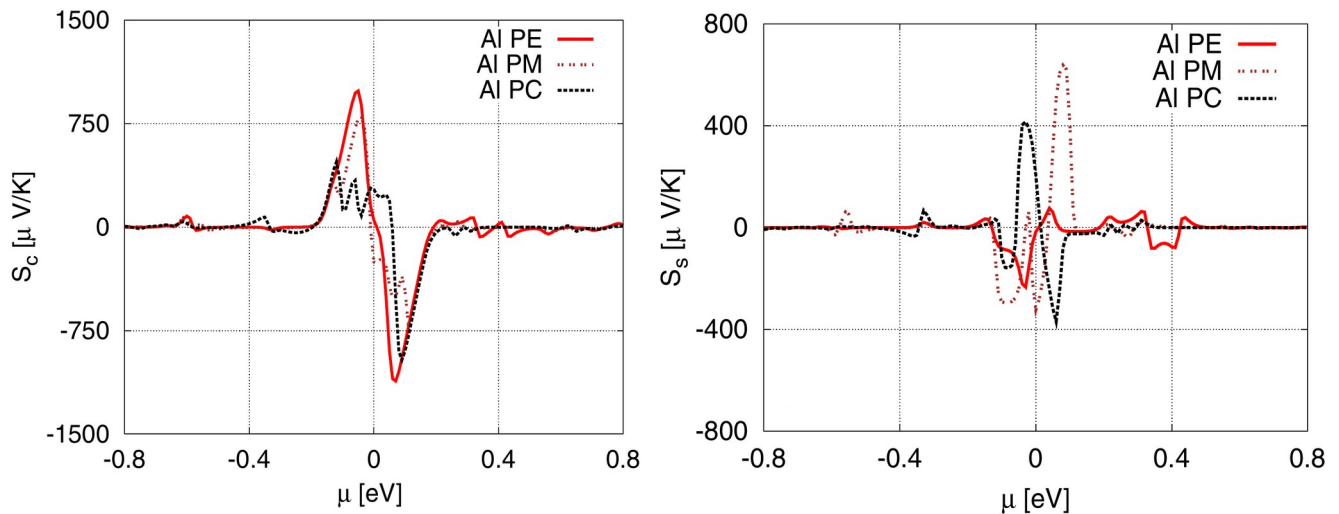
Rys. 3 Gęstość spinowa obliczona dla pozycji domieszek na brzegu paska, a) – atom Al, b) – atom P (z pracy [H.2]).

2. Rozważono szereg konfiguracji, w zależności od położenia domieszki od środka paska, jak również w przypadku, gdy koncentracja domieszek na brzegu paska zwiększała się. Gdy koncentracja na pojedynczym brzegu przekraczała wartość odpowiadającą odległości ok. 19 \AA między nimi, momenty magnetyczne na tym brzegu przyjmowały zerowe wartości i cały układ (pasek) przyjmował konfigurację FM. Oznacza to, że koncentracja domieszek atomami niemagnetycznymi pozwala uzyskać konkretny porządek magnetyczny na nanostrukturze. Stanem o najniższej energii okazał się być stan z pojedynczą domieszką na brzegu paska.

3. Pokazano, że kwantowa interferencja stanów domieszkowych zlokalizowanych w obszarze przerwy energetycznej z gęsto ułożonymi stanami atomów krzemu powoduje powstawanie rezonansów typu Fano, szczególnie widocznych dla przypadków, gdy domieszka znajduje się w pobliżu środka paska. Piki rezonansowe są widoczne w funkcji transmisji $T(E)$ okolicach $|E - E_F| \approx \pm 0.5 \text{ eV}$. W przypadku domieszek na brzegu paska, wewnątrz przerwy energetycznej widoczne są wąskie piki pochodzące od zlokalizowanych stanów domieszek.

4. Wyliczono konwencjonalny oraz spinowy współczynnik Seebecka w funkcji potencjału chemicznego dla różnych temperatur (w zakresie 100-300K). W obu przypadkach S jest znacząco modyfikowane w zależności od położenia domieszki. Dla domieszki leżącej na brzegu przebieg zmienności S_c przypominał ten z czystego silicenu. Pozostałe położenia powodowały obniżenie S_c .

całkowitego, jako, że funkcja transmisji $T_{\sigma}(E)$ dla tych przypadków była znacznie obniżona w pobliżu brzegów przerwy energetycznej. Co ciekawe, współczynnik $S_s(\mu)$ wykazywał przeciwną tendencję – najwyższą wartość (rzędu $600 \mu V/K$) przybierały piki położone na brzegach przerwy energetycznej odpowiadające atomom domieszek położonym w obszarze centralnym paska. Omówione zależności przedstawia Rys. 4 dla przypadku domieszkowania atomami Al.



Rys. 4 konwencjonalny oraz spinowy współczynnik Seebecka w funkcji potencjału chemicznego dla temperatury $T=90$ K dla różnych położenia domieszki względem brzegu paska – PE (atom Al na brzegu), PC (atom Al w środku paska) oraz PM (atom Al w położeniu pośrednim) (z pracy H.2).

Głównym wnioskiem z pracy jest to, że według obliczeń, wąskie paski silicenowe są nanoukładami, których strukturę magnetyczną oraz właściwości magnetyczne mogą być precyzyjnie modyfikowane poprzez dodanie niemagnetycznych atomów. Położenie atomów domieszek ma również bezpośredni wpływ na właściwości termoelektryczne badanych struktur.

Praca uzyskała 56 cytowań.

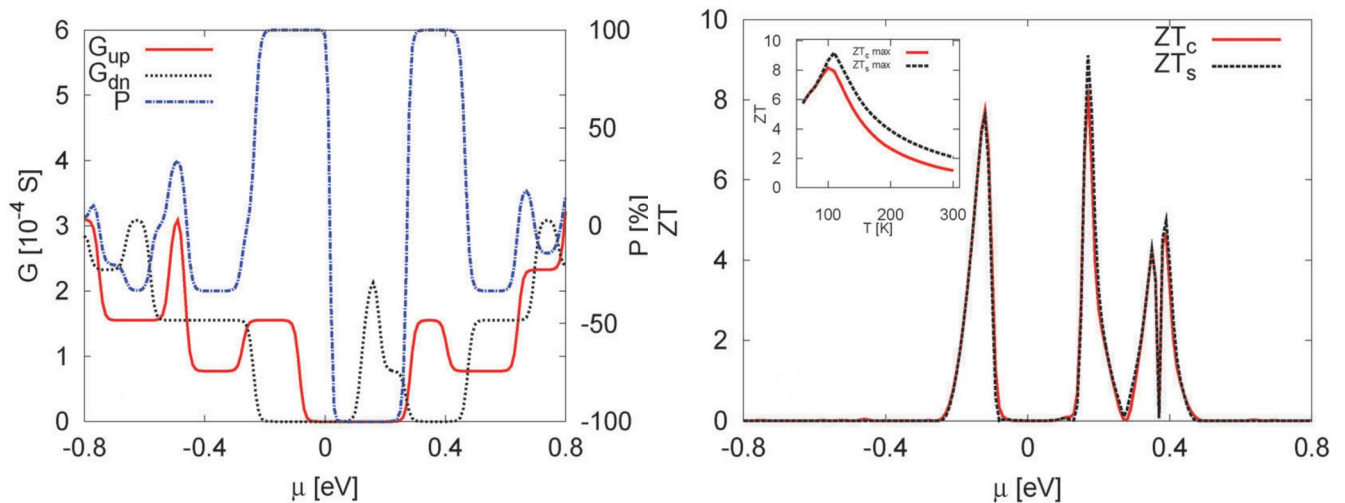
Praca H.3 koncentruje się na badaniu wpływu, jaki na wydajność termoelektryczną ma pasywacja brzegów pasków silicenowych atomami wodoru. Pasek zygzakowy posiada na brzegach niewysyczone wiązania (z ang. tzw. *dangling bonds*), do których można przyłączyć jeden lub dwa atomy wodoru.

Główne wyniki pracy są następujące:

1. Zbadano stabilność nanostruktur oraz ich właściwości elektronowe i magnetyczne w funkcji sposobu pasywacji brzegów atomami wodoru. Pokazano, że konfiguracja magnetyczna stanu podstawowego zależy od pasywacji: paski 1H-0H (na jednym brzegu do każdego atomu krzemu przyłączony jest jeden atom wodoru a na drugim go brak) i 1H-2H (ozn. analogiczne) są ferromagnetykami a paski 2H-0H i 2H-1H antyferromagnetykami. Wszystkie przypadki są półprzewodnikami z wartościami przerwy 0.2-0.4 eV.

2. W przypadku pasków ferromagnetycznych, dzięki obecności przerwy energetycznej i dużej wartości przesunięcia wymiennego w strukturze elektronowej pasm ze spinem większościowym (\uparrow) i mniejszościowym (\downarrow), w pobliżu poziomu Fermiego znajdują się regiony, gdzie jeden z kanałów spinowych jest zablokowany, a drugi przewodzący. Dzięki temu można zaobserwować dużą wartość polaryzacji spinowej prądu, zdefiniowanej jako $P = \frac{G_{\uparrow} - G_{\downarrow}}{G_{\uparrow} + G_{\downarrow}} \times 100$ (Rys. 5). Dla przypadku 1H-0H poniżej poziomu Fermiego przewodzący jest tylko kanał \uparrow , a powyżej tylko kanał \downarrow . Dla paska 1H-2H sytuacja jest podobna, z tą różnicą, że najbliższa okolica E_F jest zdominowana przez kanał \uparrow .
3. Termoelektryczne właściwości struktur FM charakteryzują się wartościami współczynników Seebecka $S_{c/s}$ rzędu $750\text{-}1200 \mu\text{V}/\text{K}$, przy czym charakteryzują się one dużą zmiennością. W przeciwieństwie do czystego silicenu, piki S_s są położone w najbliższym sąsiedztwie E_F .
4. Przynajmniej w niektórych przypadkach wyznaczono wydajności termoelektryczne $ZT_{s/c}$ z uwzględnieniem wpływu fononowych stopni swobody, metodą przedstawioną w pracy H.1. Dla obu współczynników otrzymano piki w okolicach $\pm 0.2 \text{ eV}$ w stosunku do E_F , wynoszące, odpowiednio, 8 oraz 9.5. Są to wartości bardzo duże, świadczące o potencjalnie bardzo dużej wartości wyników z punktu widzenia zastosowań (Rys. 5). Wyznaczono również zależności temperaturowe obu wydajności. Wykazano, że $ZT_{s/c}$ osiąga maksimum dla temperatury ok. 100K, ale nawet w pokojowej posiada wartość ponad 2, co jest bardzo wysokim wynikiem.
5. Dla dwóch pozostałych konfiguracji AFM (nanostruktury 2H-0H i 2H-2H), wyniki są podobne do czystego silicenu, choć maksymalne wartości S są na poziomie $1500 \mu\text{V}/\text{K}$ (więc nieco większe).

Praca uzyskała 33 cytowania.



Rys. 5 Zależna od spinu konduktancja G_s (G_{up} i G_{dn} odpowiednio dla spinów \uparrow i \downarrow) oraz polaryzacja P dla przypadku 1H-0H (a) oraz współczynniki ZT_c i ZT_s w temperaturze $T=90\text{K}$ (b). Inset pokazuje zależność maksymalnej wartości $ZT_{c/s}$ od temperatury (z pracy H.3).

Prace H.4 i H.5 kończą badania autora nad wąskimi paskami silicenu, tym razem analizując efekty domieszkowania pojedynczymi atomami magnetycznymi.

Główne wyniki **pracy H.4** są następujące:

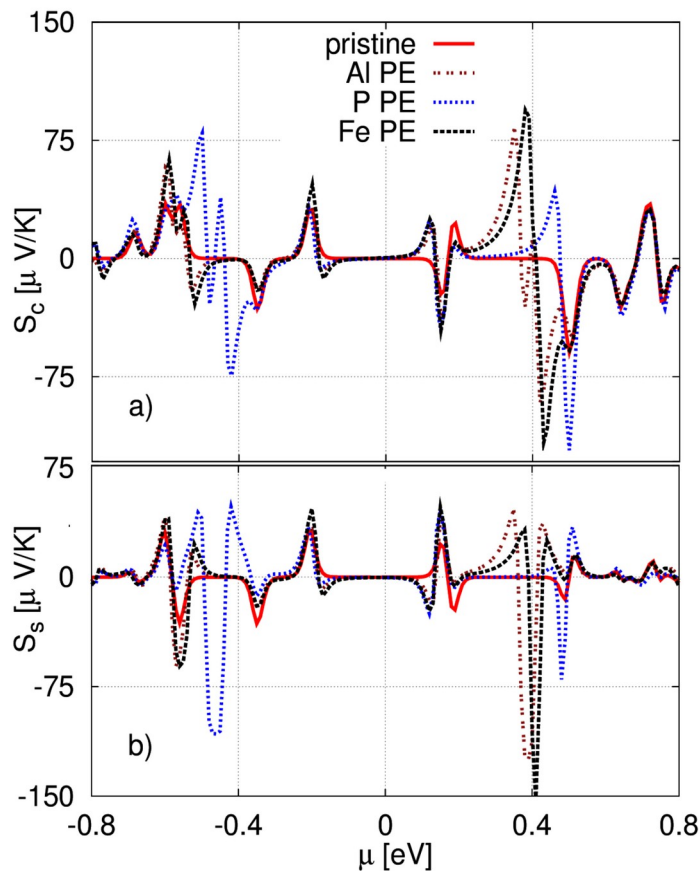
1. Rozważono wpływ domieszek pojedynczymi atomami kobaltu na strukturę elektronową, magnetyczną i właściwości termoelektryczne wąskiego paska silicenu. Pokazano, że najbardziej stabilną jest konfiguracja atomowa, w której atom domieszki jest usytuowany na brzegu paska.
2. Konfiguracją magnetyczną o najniższej energii jest porządek ferrimagnetyczny, w którym atom Co posiada moment magnetyczny skierowany zgodnie z pozostałymi atomami Si na tym samym brzegu. Atomy Si na przeciwległym brzegu mają momenty skierowane antyrównolegle.
3. Konfiguracja taka charakteryzuje się wąską (ok. 0.15 eV) przerwą energetyczną. Polaryzacja w pobliżu poziomu Fermiego natomiast wykazuje się charakterem oscylacyjnym o wartościach $\pm 75\%$.
4. Dla konfiguracji ferrimagnetycznej wyznaczono również współczynniki Seebecka, konwencjonalny i spinowy. Posiadają one piki usytuowane w pobliżu poziomu Fermiego wynoszące dość duże wartości ok. $750 \mu V/K$.

W pracy konferencyjnej H.5 skoncentrowano się na porównaniu właściwości termoelektrycznych pasków silicenowych domieszkowanych pojedynczymi atomami niemagnetycznymi (Al, P) oraz magnetycznymi (Fe):

1. Uzyskane wyniki dla domieszkowania atomami żelaza okazały się analogiczne do wyników dla kobaltu, uzyskano również stan podstawowy o konfiguracji ferrimagnetycznej.
2. Z porównania współczynników Seebecka (Rys. 6) wynika, że w pobliżu poziomu Fermiego oba rodzaje domieszek (niemagnetyczne i magnetyczne) przewidują podobne właściwości termoelektryczne badanych nanostruktur. Jest to bardzo istotny wynik, pokazujący, że efekty termoelektryczne (klasyczne i spinowe) nie zależą od typu domieszki (magnetyczna/niemagnetyczna) a jedynie od jej położenia w strukturze.

Prace uzyskały, odpowiednio, 6 oraz 0 cytowań.

W poszukiwaniu materiałów o wyższej wydajności termoelektrycznej od silicenu, zająłem się dwuwymiarowymi azotkiem boru (BN) oraz węglikiem krzemu (SiC). Ten pierwszy został otrzymany doświadczalnie w 2009 roku [Jin09] i był w tamtym czasie jednym z najlepiej poznanych materiałów 2D. Drugi natomiast w czasie przygotowywania pracy H.6 był jeszcze w fazie badań teoretycznych. Został wybrany ze względu na kryteria przedstawione w „metodologii badań”. Stabilne próbki dwuwymiarowego SiC-u metodą eksfoliacji otrzymano dopiero w 2021 roku [Chab21].



Rys. 6 Porównanie współczynnika klasycznego (a) i spinowego (b) współczynnika Seebecka dla wąskiego paska silicenu z domieszkami atomów Al, P oraz Fe położonymi na brzegu (PE) (z pracy H.5).

Węgiel krzemu (SiC) oraz azotek boru (BN), prace H.6-H.7

Praca H.6 koncentruje się na badaniu termoelektrycznych efektów spinowych w wąskich paskach SiC-u o zygzakowych brzegach pasywowanych wodorem. Główne wyniki pracy są następujące:

1. Zbadano stabilność nanostruktur w funkcji sposobu pasywacji brzegów atomami wodoru. W przypadku węgla krzemu, przeciwległe brzegi paska są zakończone atomami innego rodzaju. Z obliczeń *ab-initio* wynika, że najbardziej stabilna jest konfiguracja 1H-2H, czyli posiadająca dwa atomy wodoru na brzegu Si i jeden na brzegu C. Stanem podstawowym dla tej konfiguracji jest porządek FM z momentami zlokalizowanymi na brzegach. Struktura energetyczna charakteryzuje się bardzo wąską przerwą energetyczną, poniżej 0.1 eV.

2. Konfiguracja FM wraz z wąską przerwą pozwoliła uzyskać bardzo korzystne właściwości termoelektryczne. Bardzo stroma charakterystyka spinowo-zależnej funkcji transmisji w okolicach dolnego brzegu przerwy energetycznej w kanale \uparrow zaowocowała wysoką wartością termosily (rzędu 800 $\mu\text{V/K}$ dla obu $S_{s/c}$). Obliczenia wykazały również, że wysokie wartości termosily są stabilne również w temperaturze pokojowej.

3. W celu wyznaczenia wpływu fononowych stopni swobody na wydajność termoelektryczną przygotowano analogiczny model 4NNFC jak dla przypadku silicenu (praca H.1). Stałe dla modelu zostały dopasowane do obliczeń *ab-initio*.
4. Otrzymane wydajności okazały się być najwyższymi z dotychczas badanych przez autora struktur. Zależności $ZT_{s/c}$ od potencjału chemicznego charakteryzują się obecnością pików o wartości rzędu 10 dla temperatury 100K oraz rzędu 5 dla temperatury pokojowej.

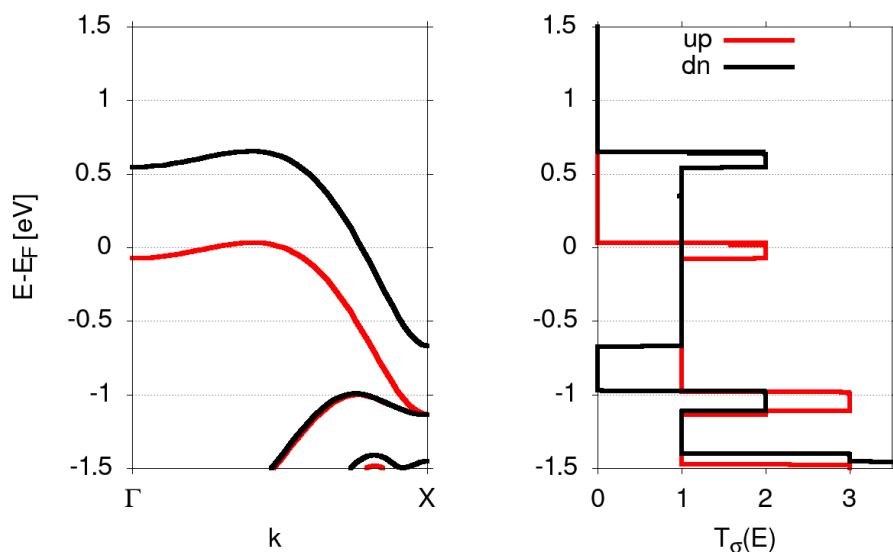
Praca uzyskała 11 cytowań.

Przedmiotem badań w **pracy H.7** były efekty termoelektryczne w wąskich paskach azotku boru w zależności od pasywacji brzegów. Obliczenia wykonane w tym przypadku wykazały, że dla przypadku pasywacji 2HB-1HN bądź 0HN-0HB jeden kanał spinowy jest zablokowany nieco powyżej poziomu Fermiego, co powoduje, że efekty spinowe termoelektryczne są szczególnie silne.

Główne wyniki pracy są następujące:

1. Zbadano stabilność nanostruktur w funkcji sposobu pasywacji brzegów atomami wodoru. Podobnie jak w przypadku nanostruktur z SiC-u, również dla BN brzegi paska są zakończone różnymi atomami. Pokazano, że najbardziej stabilnym jest przypadek 2HB-1HN (dwa atomy H na brzegu B i jeden atom na brzegu N).
2. Wyniki obliczeń *ab-initio* pokazały, że *nanoribbon* 2HB-1HN jest ferromagnetykiem z niezerowymi momentami magnetycznymi położonymi tylko po stronie B paska (Rys. 7). W przeciwieństwie do poprzednio badanych materiałów, struktura pasmowa paska BN dla takiej pasywacji brzegów jest metaliczna. Jak widać z Rys. 7, funkcja transmisji dla kanału \uparrow jest zerowa tuż powyżej poziomu Fermiego. Jak pokazano w pracy, powoduje to znaczny wzrost współczynnika Seebecka.
3. Otrzymane dla zakresu temperatur 100K-300K współczynniki Seebecka $S_{c/s}$ charakteryzują się maksimumami rzędu $750 \mu V/K$ w odległości ok. 0.15 eV (dla T=100K) od poziomu Fermiego. W wyższym zakresie temperatur piki, jak w przypadkach wcześniejszych struktur, przesuwiają się w kierunku rosnącego potencjału chemicznego, lecz ich wartość pozostaje stała.
4. Wpływ fononowych stopni swobody na wydajność termoelektryczną dla przypadku BN oszacowana została na podstawie danych literaturowych. Współczynnik κ_{ph} jest w przypadku tego materiału bardzo niski (maksimum w temperaturze pokojowej wynosi ok. $1.2 nW/K$), dzięki czemu jego wpływ na $ZT_{s/c}$ jest mały.
5. Wyznaczone dla 2HB-1HN wydajności okazały się bardzo duże, rzędu 30 (ponad pięciokrotnie wyższe, niż dla przypadku silicenu i SiC-u), stąd podtytuł pracy „optymalny układ termoelektryczny”
6. Wyznaczono również wydajność termoelektryczną dla pozostałych konfiguracji pasywacji brzegów. Dla przypadku braku atomów H na brzegach paska (0HB-0HN) wydajność wzrosła do 50.

Praca uzyskała 11 cytowań.



Rys. 7 Zależna od spinu struktura pasmowa oraz transmisja dla paska BN o pasywacji brzegów 2HB-1HN (z pracy H.7)

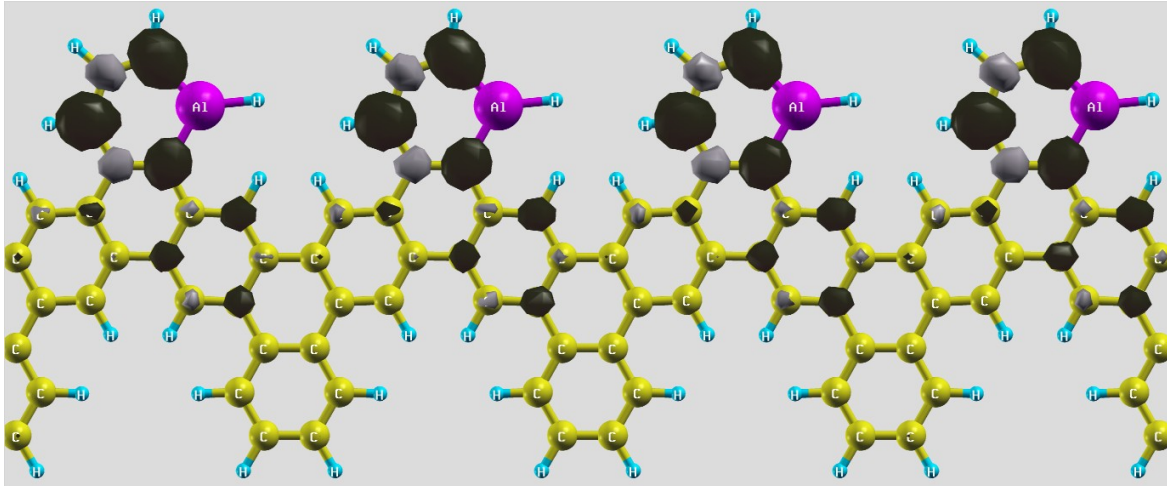
Polimery węglowe, prace H.8-H.11

Kolejne trzy prace (H.8-H.10) koncentrują się na badaniu obszernej rodziny polimerów węglowych. Zostały one po raz pierwszy otrzymane eksperymentalnie w latach 2008-09 [Ynag08, Cai09]. Proces polimeryzacji polega na łączeniu monomerów (10,10'-dibromo-9,9'-biantryl) na podłożu ze złota. W zależności od warunków przeprowadzania poszczególnych etapów polimeryzacji (m.in. temperatury) można otrzymać *nanoribbony* liniowe (fotelowe) bądź V-kształtne (zwane też szewron). Z punktu widzenia optymalizacji właściwości termoelektrycznych, znacznie bardziej korzystne są te drugie, gdyż pozwalają na potencjalnie łatwe wprowadzanie modyfikacji, takich jak domieszkowanie i funkcjonalizacja. Domieszki można wprowadzać, zastępując część czystych monomerów domieszkowanymi. Natomiast funkcjonalizacja polega na przyłączaniu odpowiednich grup funkcyjnych do czystych *nanoribbonów*.

W pracy H.8 analizowane są właściwości transportowe oraz termoelektryczne *nanoribbonów* grafenowych mających specyficzną strukturę atomową typu szewron. W pracy głównym przedmiotem badań zostały polimery domieszkowane atomami glinu (Al) bądź azotu (N). Atomy domieszek rozłożone były równomiernie na jednym z brzegów nanostruktury. Odpowiada to syntezie polimeru z domieszkowanych monomerów (Rys. 8).

Główne wyniki pracy są następujące:

1. Metodami *ab-initio* wykazano stabilność domieszkowanych nanostruktur. Algorytmem genetycznym globalnej optymalizacji zaimplementowanym przez autora wniosku przeszukano przestrzeń możliwych konfiguracji atomowych, dzięki czemu znaleziono optymalne energetycznie przypadki.
2. Otrzymane struktury posiadają niezerowy moment magnetyczny, zlokalizowany na atomach węgla leżących w bezpośrednim sąsiedztwie domieszek (na wspólnym pierścieniu węglowym). Otrzymane konfiguracje magnetyczne odpowiadały porządkowi ferromagnetycznemu. W obu przypadkach struktury posiadały niezerową przerwę energetyczną (0.85 eV dla dom. Al oraz 0.35 eV dla dom. N).



Rys. 8 Struktura atomowa oraz gęstość spinowa *nanoribbona* węglowego typu szewron domieszkowanego pojedynczymi atomami Al (z pracy H.8).

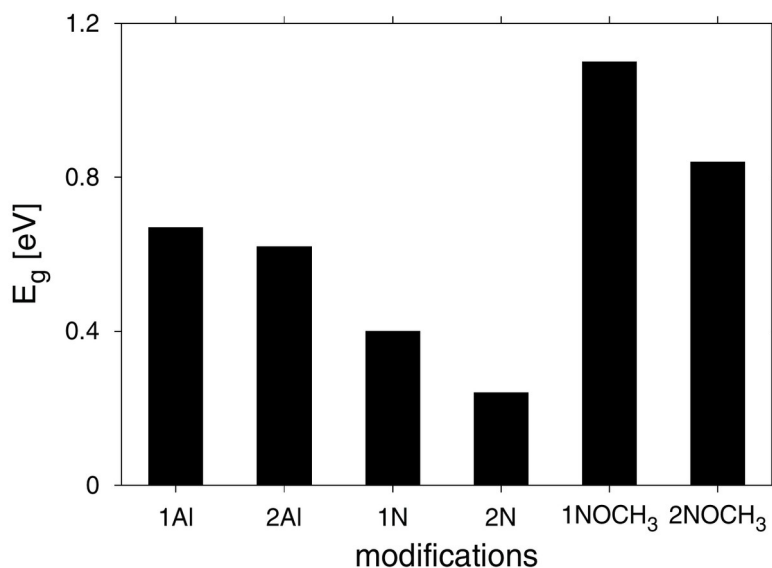
3. Wyznaczono konwencjonalny oraz spinowy współczynnik Seebecka w funkcji potencjału chemicznego dla różnych temperatur (w zakresie 100-300K). W przypadku polimerów domieszkowanych Al otrzymano dla temperatury pokojowej wartości maksymalne rzędu 1000-1200 $\mu V/K$ (odpowiednio dla S_c i S_s). Dla przypadku domieszkowania N wartości te były nieco niższe (do ok. 750 $\mu V/K$), ale również znaczne.
4. Aby oszacować wpływ fononowych stopni swobody na wydajność termoelektryczną użyto podejścia półklasycznego do wyznaczenia widma fononów. Stałe siłowe zostały wzięte z dostępnej literatury dla grafenu.
5. Otrzymana wydajność $ZT_{c/s}$ rzędu 30 nawet w temperaturze pokojowej stawia badane polimery na czele badanych w literaturze nanostruktur węglowych.

Praca uzyskała 10 cytowań.

W pracy H.9 kontynuowane są studia nad wpływem modyfikacji na właściwości polimerów węglowych rozpoczęte w pracy H.8. Zbadane zostały struktury polimerowe posiadające atomy domieszki Al i N na obu brzegach oraz struktury czyste, pasywowane na brzegach grupami funkcyjnymi $NOCH_3$.

Główne wyniki pracy są następujące:

1. Wykazano, że modyfikując brzegi polimeru pojedynczymi atomami lub podłączając do brzegów grupy funkcyjne można modyfikować wartość przerwy energetycznej w zakresie od 0.2 (atomy N na obu brzegach) do 1.2 eV (grupa funkcyjna na jednym brzegu). Wykonano studia stabilności ww. struktur. Jak widać z Rys. 9 daje to możliwość inżynierii przerwy takich łańcuchów węglowych.



Rys. 9 Wartość przerwy energetycznej dla polimerów węglowych z domieszkami oraz grupami funkcyjnymi dołączonymi na brzegach paska (z pracy H.9).

2. Wszystkie struktury posiadały niezerowy całkowity moment magnetyczny z pojedyncze momentami zlokalizowanymi na atomach C w pobliżu atomów domieszki lub grupy funkcyjnej. Stan podstawowy odpowiadał we wszystkich przypadkach porządkowi ferromagnetycznemu.
3. Porównanie współczynników Seebecka pokazało bardzo wysoką wartość siły spinowej dla przypadku 1NOCH₃ rzędu 1500 $\mu V/K$.

Praca uzyskała 1 cytowanie.

W ostatniej pracy na temat polimerów węglowych (**H.10**) badano wpływ funkcjonalizacji grupami nitrowymi (NO) na właściwości termoelektryczne. Tym razem obliczona wydajność termoelektryczna, zarówno konwencjonalna jak i spinowa, osiągnęła wartość powyżej 40. Główne wyniki pracy są następujące:

1. Zbadano stabilność domieszkowanych nanostruktur dla różnych możliwych konfiguracji grup funkcyjnych. Należały one do dwóch typów: w pierwszym (I) grupa NO jest z jednej strony dołączona do atomu węgla (wiązanie aromatyczne, a z drugiej do grupy metylowej. W drugim (II) grupa NO tworzy dwa wiązania z dwoma węglami należącymi do pierścienia aromatycznego. W ten sposób otrzymano 5 stabilnych struktur, których parametry termoelektryczne zostały wyliczone w dalszej części pracy.
2. Obie grupy struktur wykazują właściwości magnetyczne. Dla struktur z grupy I momenty magnetyczne są zlokalizowane na atomach N oraz O. Dla struktur z grupy II dodatkowo niewielkie wartości występują dodatkowo na sąsiednich atomach węgla. Otrzymany porządek jest

ferromagnetyczny, przy czym, oczywiście, jeżeli grupy funkcyjne znajdują się tylko po jednej stronie (dwa przypadki z pięciu), momenty magnetyczne występują tylko po jednej stronie struktury.

3. Wyznaczono konwencjonalny oraz spinowy współczynnik Seebecka w funkcji potencjału chemicznego dla różnych temperatur (w zakresie 100-300K). Ich wartości rozciągają się w przedziale 500-750 $\mu V/K$.

4. Wyznaczono wydajność termoelektryczną włącznie z wpływem na nią efektów fononowych. W przypadku struktur z obu grup maksymalna wartość zarówno konwencjonalnej jak i spinowej wydajności przekroczyła wartość 60 w temperaturze pokojowej.

Praca uzyskała 4 cytowania.

Łańcuchy węglowe, prace H.11-H.12

Ostatnie dwie prace dotyczyły badania właściwości magnetycznych oraz termoelektrycznych w łańcuchach węglowych otrzymanych jeszcze w latach 90-tych XX-go wieku [Ish91].

Praca H.11 dotyczyła badania właściwości magnetycznych oraz termoelektrycznych łańcuchów węglowych. Łańcuchy takie zostały otrzymane doświadczalnie jeszcze w latach 80-tych ubiegłego wieku, lecz ich właściwości nigdy nie zostały poddane głębszej analizie. W przeciwieństwie do struktur analizowanych w pracy H.10, gdzie grupy nitrowe były użyte do funkcjonalizacji struktur, w przypadku łańcuchów analizowanych tutaj, grupy nitrowe były naturalnym elementem struktur, łączącym pierścienie węglowe.

Główne wyniki pracy są następujące:

1. Pokazano, że niezerowy moment magnetyczny jest zlokalizowany głównie na grupie NO, łączącej poszczególne pierścienie łańcucha.

2. Wyznaczono konwencjonalny oraz spinowy współczynnik Seebecka w funkcji potencjału chemicznego dla różnych temperatur (w zakresie 100-300K). W przypadku współczynnika spinowego, uzyskano wynik równy prawie 2000 $\mu V/K$, czyli najwyższy ze wszystkich badanych przez autora struktur.

Praca uzyskała 4 cytowania.

Prace nad łańcuchami węglowymi oraz w ogóle nad efektami termoelektrycznymi w nanostrukturach konkluduje **praca H.12** konferencyjna przygotowana na konferencję Physcs of Magnetism 2017 w Poznaniu.

W pracy analizowano efekty termoelektryczne w zależności od długości łańcuchów węglowych połączonych grupą funkcyjną NO.

1. Rozważono cztery struktury, o różnej długości łańcuchów węglowych.

2. Wykazano, że współczynniki Seebecka są stabilne w funkcji długości łańcuchów, co jest korzystne z punktu widzenia doświadczalnego otrzymywania ww. struktur.
3. Dla temperatury pokojowej funkcja S_s posiada szerokie plateau (-0.4 do 0.4 eV) wynoszące ok. 1500 $\mu V/K$.

Rozdział „Silicene nanoribbons” w monografii, „Silicon Nanomaterials Sourcebook”, H.13

W rozdziale H.13, liczącym 42 strony, przedstawiono przekrój prac doświadczalnych oraz teoretycznych dotyczących wąskich pasków silicenu. Część teoretyczna, oprócz analizy literatury, zawiera również oryginalne, opublikowane, wyniki autora.

Podział prac pomiędzy Współautorów publikacji H.1-H.12 był następujący:

Krzysztof Zberecki: obliczenia *ab-initio* (struktura pasmowa, funkcja transmisji, struktura fononowa materiałów 2D), wyznaczanie współczynników termoelektrycznych, przygotowanie manuskryptu, dyskusja wyników i wnioski

Michał Wierzbicki: wyznaczenie struktury fononowej nanostruktur 1D w modelu 4NNFC oraz w podejściu kwaziklasycznym, wyznaczenie wkładu fononowego do konduktancji termicznej, dyskusja otrzymanych wyników.

Renata Świrkowicz: dyskusja otrzymanych wyników oraz przeczytanie i ocena wstępnej wersji manuskryptu.

Józef Barnaś: pomoc w interpretacji otrzymanych wyników numerycznych oraz pomoc w przygotowaniu końcowej wersji manuskryptu.

Deklaracje Współautorów znajdują się w załączniku nr 4 „Wykaz osiągnięć”.

Podsumowanie

Do najważniejszych osiągnięć opisanych w cyklu publikacji [H1-H13], które stanowią podstawę wniosku o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego zaliczam:

1. Wykazanie, że spinowe efekty termoelektryczne o wysokim współczynniku ZT można otrzymać w niskowymiarowych układach kwantowych o postaci wąskich pasków, posiadających niezerowe momenty magnetyczne. W szczególności, moje prace dotyczące właściwości silicenu wniosły znaczny wkład do badań nad zjawiskami termoelektrycznymi nanostruktur, co ma odzwierciedlenie w wysokiej liczbie cytowań prac H.1-H.3 – odpowiednio 114, 56 i 33 cytowania.

2. Pokazanie, że właściwości elektronowe, magnetyczne i termoelektryczne wąskich pasków materiałów dwuwymiarowych są podatne na modyfikacje polegające na wprowadzaniu pojedynczych atomów domieszek lub funkcjonalizacji brzegów paska. W szczególności, modyfikacje takie pozwalają na optymalizację wydajności termoelektrycznej w silicenie oraz dwóch pozostałych materiałach (SiC i

BN). Prace H.2-H.7 stanowią obszerne studium tego zagadnienia posiadające sumaryczną ilość 117 cytowań.

3. Wykazanie, że bardzo wysokie wartości wydajności termoelektrycznej można uzyskać również w strukturach węglowych. W pracach H.8-H.10 pokazano, że *nanoribbony* o strukturze typu szewron, domieszkowane bądź funkcjonalizowane grupami funkcyjnymi posiadają wartości współczynników $ZT_{c/s}$ wyższe nawet od badanych wcześniej struktur Si, SiC i BN.

4. Wyniki, opublikowane w pracach H.11-H.12 wykazują, że dobrymi kandydatami na wysoko wydajne struktury niskowymiarowe, mogą być również polimery węglowe. Zaletą tych materiałów jest to, że są one znane od kilku dziesięcioleci i technologia ich wytwarzania jest dobrze poznana.

Warto również podać porównanie wartości ZT dla struktur z prac H.1-H.13 z maksymalnymi wartościami, jakie można znaleźć w aktualnej literaturze. Materiały masywne (3D) charakteryzują się wydajnością rzędu 1, przykładem mogą być związki Co_4Sb_{12} domieszkowane atomami Yb, In bądź Na (Tabela I z pracy [Sin22]) wraz z podanymi tam referencjami). Nieco wyższe wartości ZT można uzyskać w materiałach 2D (monowarstwach i surersieciach) sięgające 2-2.5 dla temperatury pokojowej – np. w cienkich warstwach Bi_2Te_3/Sb_2Te_3 [Ven01] lub monowarstwie As_2S_3 [Pat20].

Dla przypadku 1D (*nanoribbony*) rekordowe wartości otrzymane teoretycznie, jakie można znaleźć w literaturze (zgodnie z najlepszą wiedzą Autora) sięgają maksymalnie 6.4 dla fosforenu w $T=300K$ oraz BN (do 12 w $T=800K$). Kilka pozostałych rekordowych przykładów pokazuje poniższa tabela ($T=300K$), pełniejszy ogląd można znaleźć w pracy [Sin22].

Materiał	ZT	Referencja
Grafen	6	Appl. Phys. Lett. (2012) 100, 093104
MoS ₂	2.7	Appl Phys Lett. (2014) , 105, 133113
Heterostruktura MoS ₂ /WS ₂	5.5	Sci Rep. (2016), 6, 21639
Fosforen	6.4	Sci Rep.(2014) 4, 6452
BN	12 (T=800K)	AIP Advances (2021) 11, 055120
Różne struktury hybrydowe dichalkogenków	7.4	J Appl Phys. (2016), 120, 235109

Widać więc, że współczynniki ZT wyznaczone teoretycznie dla struktur 1D w pracach zaprezentowanych we Wniosku są porównywalne, a w kilku przypadkach znacznie wyższe, od wartości dla struktur znanych z literatury.

Uważam, że powyżej opisane osiągnięcia, opisane w przedstawionym we Wniosku cyklu publikacji, wnoszą istotny wkład do dziedziny termoelektryki i kalorytroniki spinowej. Zostały one opublikowane

we wiodących czasopismach specjalistycznych, a ilość cytowań świadczy o znacznym zainteresowaniu środowiska naukowego ich wynikami.

5. Informacja o wykazywaniu się istotną aktywnością naukową realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej, w szczególności zagranicznej.

Po doktoracie odbyłem czteromiesięczny staż w Instytucie Elektroniki, Mikroelektroniki i Nanotechnologii (IEMN) w Lille, Francja (1.09.2008-20.12.2008), gdzie zajmowałem się modelowaniem kwantowych laserów kaskadowych za pomocą metod Monte Carlo. Otrzymane wyniki posłużyły do przygotowania studium wykonalności części symulacyjnej projektu badawczego zamawianego „Zaawansowane technologie dla półprzewodnikowej optoelektroniki podczerwieni”, którego byłem wykonawcą.

Od roku 2020 współpracuję z grupą z Uniwersytetu Południowej Florydy, kierowanej przez prof. M. Batzilla. Efektem tej współpracy są publikacje [E1-E3].

6. Informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę.

Opieka naukowa nad studentami

1. Promotor prac inżynierskich (2008–2023) – Wydział Fizyki Politechniki Warszawskiej, 5 studentów
2. Promotor prac magisterskich (2008–2023) – Wydział Fizyki Politechniki Warszawskiej, 3 studentów oraz 3 studentów jako koordynator ze strony Wydziału Fizyki PW (dla prac magisterskich realizowanych w innych instytucjach).

Prowadzone zajęcia dydaktyczne (2008-2023)

Przygotowywałem i prowadziłem szereg zajęć na Wydziale Fizyki Politechniki Warszawskiej oraz innych wydziałach, zarówno w języku polskim jak i angielskim. Spośród nich warto wymienić:

- przygotowanie materiałów i prowadzenie laboratoriów, ćwiczeń i wykładu z przedmiotu „Kwantowe metody fizyki ciała stałego”
- przygotowanie materiałów i prowadzenie laboratoriów i wykładu z przedmiotu „Komputerowe metody symulacji”
- przygotowanie materiałów i prowadzenie laboratoriów i wykładu z przedmiotu „Zastosowanie metod *ab-initio* do wyznaczania właściwości materiałów”
- przygotowanie materiałów i prowadzenie laboratoriów i wykładu z przedmiotu „Wstęp do fizyki magnetyków”

- przygotowanie materiałów i prowadzenie laboratoriów i wykładu z przedmiotu „Programowanie w środowisku MS .NET”
- prowadzenie ćwiczeń z przedmiotu „Mechanika kwantowa”
- prowadzenie wykładu z przedmiotów „Physics I” i „Physics II” (Wydz. IBHiŚ) oraz „Modern physics” (Wydz. MEiL i MiNI) – w jęz. angielskim

W chwili obecnej w przygotowaniu znajduje się skrypt „Podstawy obliczeniowe fizyki ciała stałego”, który planuję wydać jesienią 2023 r.

Działalność organizacyjna na Wydziale Fizyki PW

W latach 2009-2012 współtworzyłem oprogramowanie dla Dziekanatu Wydziału Fizyki służące do zarządzania przebiegiem studiów (od roku 2012 jest to system USOS).

Od roku 2013 do dzisiaj jestem członkiem Komisji Dyplomowej Inżynierskiej, dla specjalności „Materiały i nanostruktury”.

Stworzyłem i opiekuję się stroną WWW „Pracowni modelowania nowych materiałów”.

7. Inne osiągnięcia naukowe

Dalszy dorobek naukowy

Dla pełnej informacji o moim dorobku naukowym podaję także tematy pozostałych prac wykonanych przeze mnie po doktoracie w kilku innych gałęziach fizyki.

Przez pewien czas po doktoracie kontynuowałem badania z dziedziny teorii jądra atomowego, w szczególności dotyczące korelacji oktapolowych w jądrach atomowych w przybliżeniu wychodzącym poza przybliżenie pola średniego. Wynikiem tych badań jest praca:

A1. K. Zberecki, P.H. Heenen, P. Magierski, „Nuclear tetrahedral configurations at spin zero”, *Physical Review C*, 79, 1, 014319, (2009), IF=3.13

Praca uzyskała 21 cytowań.

Następnie zająłem się badaniem zjawisk magnetycznych w nowych materiałach. Wynikiem tych badań są następujące prace:

B1. K. Zberecki, L. Adamowicz, M. Wierzbicki, „Ab initio prediction of half-metallic ferromagnetic metamaterials composed of alkali metals with nitrogen”, *Physica Status Solidi B*, 246(10), pp. 2270-2278 (2009), IF = 1.45, 9 cytowań

B2. K. Zberecki, „Emergence of magnetism in doped two-dimensional honeycomb structures of III-V binary compounds”, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* 25(7), pp. 2533-2537 (2012), IF = 1.13, 10 cytowań

- B3.** K. Zberecki, „Magnetism in doped two-dimensional honeycomb structures of III-V binary compounds”, *Acta Physica Polonica A*, 121(5-6), pp. 1240-1241 (2012), IF = 0.54, 1 cytowanie
- B4.** K. Zberecki, M. Wilczynski, M. Wierzbicki, „Fourth order Heisenberg models with minimal number of parameters for two-dimensional magnetic crystals”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, (2023) 568, 70385. IF=3.09, 0 cytowań
- B5.** M. Wilczynski, K. Zberecki, M. Wierzbicki, „The spin-polarized tunnel current and the spin-transfer torque in triple-barrier junctions with external electrodes and quantum wells made of ferromagnetic materials”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, (2023) 580, 170901. IF=3.09, 0 cytowań

Jak widać z powyższego spisu, tematyka była dość szeroka. Wspólnym mianownikiem była próba opisu magnetyzmu w nowych materiałach, hipotetycznych bądź niedawno zsyntetyzowanych. W pracy **B1** zaproponowano i przedyskutowano stabilność i właściwości magnetyczne lekkich związków azotu z berylowcami. Celem było uzyskanie na drodze teoretycznej magnetycznych związków pozbawionych elektronów d w zewnętrznych powłokach (co było w czasie pisania pracy istotnym obszarem badań) o strukturze elektronowej pół-metalicznego ferromagnetyka. Otrzymano szereg stabilnych konfiguracji, spełniających ww. kryteria. W pracach **B2 i B3** zajmowano się inną klasą struktur magnetycznych, jaką były domieszkowane struktury dwuwymiarowe oparte o symetrię plastra miodu. Była to kontynuacja prac nad lekkimi związkami azotu, przeanalizowano bowiem związki GaN i AlN, domieszkowane atomami magnetycznymi. W najnowszej pracy, **B4**, zaproponowano model magnetyzmu dla magnetycznego związku CrI_3 (niedawno otrzymanego eksperymentalnie), oparty o anizotropowy model Heisenberga z poprawkami czwartego rzędu. Stałe modelu dopasowano do wyników obliczeń *ab-initio* dla szeregu konfiguracji magnetycznych.

W obszarze moich zainteresowań znajduje się również badanie zjawisk dynamicznych w nanostrukturach. Ma to odzwierciedlenie w pracach:

- C1.** A. Dużyńska, J. Judek, K. Wilczyński, K., Zberecki, A. Łapińska, A. Wróblewska, M. Zdrojek, „Temperature-induced phonon behavior in titanium disulfide (TiS_2) nanosheets”, *Journal of Raman Spectroscopy* 50, 8, pp. 1114-1119 (2019), IF = 2.80, 8 cytowań
- C2.** K. Pięta, C. Jastrzebski, K. Zberecki, D. Jastrzebski, W. Paszkowicz, S. Podsiadło, „Synthesis and structural characterization of $\text{Ag}_2\text{ZnSnS}_4$ crystals”, *Journal of Solid State Chemistry*, (2020), 290, 121467, IF=3.66, 8 cytowań
- C3.** J. Judek, P. Wróbel, P. Michałowski, M. Ozga, B. Witkowski, A. Seweryn, M. Struzik, C. Jastrzębski, K. Zberecki, „Titanium Nitride as a Plasmonic Material from Near-Ultraviolet to Very-Long-Wavelength Infrared Range” *Materials*, (2021), 14(22), 7095, IF=3.4, 8 cytowań

Wszystkie powyższe prace zostały wykonane we współpracy z grupami eksperymentalnymi działającymi na kilku wydziałach Politechniki Warszawskiej. Wkładem autora wniosku było porównanie obliczonych przez siebie właściwości fononowych (mody fononowe, widmo Ramana) badanych materiałów z wynikami doświadczalnymi. Otrzymane wyniki posłużyły do charakteryzacji

próbek. Ponadto, w pracy **C3**, obliczenia oparte o rachunek zaburzeń w teorii funkcjonału gęstości (DFPT) pozwoliły wyjaśnić doświadczalnie otrzymane właściwości optyczne próbek.

Zająłem się również poszukiwaniem nowych materiałów metodami globalnej optymalizacji. Zaowocowało to następującymi pracami:

D1. K. Zberecki, „Atomic and electronic properties of few-layer hexagonal boron”, *Solid State Communications*, (2020), 307, 113804, IF=1.93, 1 cytowanie

D2. G. Matyszczak, K. Zberecki, „Application of artificial neural network and global optimization techniques for high throughput modeling of the crystal structure of stannites and kesterites”, *Journal of Computational Chemistry*, (2021), 42(11), 740, IF=3.67, 5 cytowań

D3. K. Zberecki „Structure prediction of two-dimensional materials based on neural network-driven evolutionary technique”, *Computational Materials Science*, (2021), 186, 110046, IF=3.57, 0 cytowań

D4. K. Zberecki „Magnetic properties of two-dimensional M_2N_3 (M-metal, N=S,Se,Te) compounds”, nieopublikowane, preprint <https://arxiv.org/abs/2006.09757>

Zastosowanie algorytmów globalnej optymalizacji oraz sztucznej inteligencji do poszukiwania nowych materiałów są obecnie jednym z głównych kierunków badań w fizyce materiałowej. Trzy powyższe prace wpisują się w ten trend. W pierwszej z nich, **B1**, zastosowano autorską implementację algorytmu genetycznego do znalezienia stabilnych struktur dwuwymiarowych zbudowanych z atomów boru. Po raz pierwszy pokazano, że kilkuwarstwowe nanostruktury z czystego boru mogą być stabilne oraz, że ilość warstw jest skorelowana z wartością przerwy energetycznej. WW. algorytm został rozbudowany oraz opublikowany w pracy **B3**. Jego implementacja, kod NGOpt jest swobodnie dostępny na platformie Github.

W ramach współpracy z Uniwersytetem Południowej Florydy zająłem się również badaniem magnetycznych struktur warstwowych (dwuwymiarowych) opartych o nowe materiały należące do szerokiej rodziny dichalkogenków metali przejściowych. Wyniki moich obliczeń zostały opublikowane w następujących pracach:

E1. M. Bonilla, S. Kolekar, J. Li, Y. Xin, P. M. Coelho, K. Lasek, K. Zberecki, D. Lizzit, E. Tosi, P. Lacovig, S. Lizzit, M. Batzill, „Compositional Phase Change of Early Transition Metal Diselenide (VSe_2 and $TiSe_2$) Ultrathin Films by Postgrowth Annealing”, *Advanced Materials Interfaces*, (2020), 7(15), 2000497, IF=6.39, 11 cytowań

E2. K. Lasek, P. M. Coelho, K. Zberecki, Y. Xin, S. K. Kolekar, J. Li, M. Batzill, „Molecular Beam Epitaxy of Transition Metal (Ti-, V-, and Cr-) Tellurides: From Monolayer Ditellurides to Multilayer Self-Intercalation Compounds”, *ACS Nano* (2020), 14, 7, 8473, IF=17.1, 56 cytowań

E3. K. Lasek, P. M. Coelho, P. Gargiani, M.I Valvidares, K. Mohseni, H. L. Meyerheim, I. Kostanovskiy, K. Zberecki, M. Batzill „Van der Waals epitaxy growth of 2D ferromagnetic $Cr(1+\delta)Te_2$ nanolayers with concentration-tunable magnetic anisotropy”, *Applied Physics Reviews* (2022) 9, 011409, IF=15.0, 8 cytowań.

Moim wkładem było porównanie wyników doświadczalnych z obliczeniami *ab-initio* dotyczącymi stabilności strukturalnej i właściwości magnetycznych nowych struktur dwuwymiarowych. Otrzymane przeze mnie na drodze minimalizacji struktury dobrze opisują właściwości atomowe otrzymanych struktur, o czym świadczy porównanie symulacji obrazów STM z zarejestrowanymi doświadczalnie. Ponadto, moje symulacje dynamiki molekularnej *ab-initio* (AIMD) pozwoliły wyjaśnić przebieg procesu tworzenia badanych nanostruktur w procesie MBE.

Konferencje i referaty

Wyniki moich prac zaprezentowane zostały na 10 konferencjach międzynarodowych (w tym 1 na zaproszenie):

1. Physics of Magnetism, Poznań, czerwiec 2011, „Magnetism in doped two-dimensional honeycomb structures of III-V binary compounds”, K. Zberecki – plakat
2. EMRS Warszawa, wrzesień 2012, „Charge transport in graphene nanostructures” K. Zberecki, M. Wierzbicki – plakat.
3. European Conference on Molecular Magnetism (ECMM), maj 2013, Karlsruhe, Niemcy „Transport and magnetic properties of silicene nanoribbons” K. Zberecki , M. Wierzbicki, J. Barnaś and R. Swirkowicz – plakat.
4. Physics of Magnetism, Poznań, czerwiec 2014, „Thermoelectric properties of doped zigzag silicene nanoribbons”, K. Zberecki , M. Wierzbicki, J. Barnaś and R. Swirkowicz – wystąpienie ustne.
5. 9th International Conference on Surfaceces, Coatings and Nano-Structured Materials (NANOSMAT), Dublin, Irlandia, wrzesień 2014, „Thermoelectric properties of zigzag silicene nanoribbons doped with magnetic impurity atoms”, K. Zberecki , J. Barnaś and R. Swirkowicz – wystąpienie ustne.
6. EMRS Warszawa, wrzesień 2015, „Spin thermoelectric phenomena in asymmetricly terminated boron-nitride nanoribbons”, K. Zberecki , J. Barnaś and R. Swirkowicz – wystąpienie ustne.
7. EMRS Lille, Francja, maj 2016, „Thermoelectric phenomena in chemically synthesized graphene nanoribbons with substitution atoms and functional groups.”, K. Zberecki , J. Barnaś and R. Swirkowicz – plakat.
8. Physics of Magnetism, Poznań, czerwiec 2017, „Thermoelectric phenomena in chemically synthesized graphene nanoribbons with substitution atoms and functional groups”, K. Zberecki , J. Barnaś and R. Swirkowicz – plakat.
9. 2nd Global Conference on Magnetism and Magnetic Materials (GCMMM-2019), Rzym, Włochy, lipiec 2019, „Spin thermoelectric phenomena in nanostructures – a computational study” – referat zaproszony
10. SPICE Online Workshop, Mainz, Niemcy, sierpień 2020, „Molecular Beam Epitaxy of Self-Intercalated Transition Metal Tellurides” K. Lasek, P. M. Coelho, K. Zberecki, Y. Xin, S. K. Kolekar, J. Li and M. Batzill – wystąpienie ustne

Ponadto, dwukrotnie wygłosiłem zaproszony referat na seminarium wydziałowym polskich uczelni (Wydziały Fizyki Uniwersytetów w Poznaniu i Lublinie)

Trzykrotnie prezentowałem wyniki na sesjach sprawozdawczych ICM UW (biorąc w niej udział członkowie grantów obliczeniowych ICM) – co można potraktować jako udział w konferencji krajowej.

Granty

Byłem wykonawcą dwóch grantów:

- Projekt zamawiany „Zaawansowane technologie dla półprzewodnikowej optoelektroniki podczerwieni” – kierownik prof. dr hab. Maciej Bugajski, ITE Warszawa
- Grant NCN DEC-2012/04/A/ST3/00372, kierownik prof. dr hab. Józef Barnaś, Uniwersytet im. Adam Mickiewicza, Poznań

Ponadto, jestem kierownikiem dwóch grantów obliczeniowych

- Grant ICM G30-14 „Struktura pasmowa i dynamika sieci krystalicznej domieszkowanych półprzewodników o szerokiej przerwie energetycznej” (od pięciu lat)
- Grant PL-Grid „Nanotrans” (od siedmiu lat)

Nagrody

- Nagroda Zespołowa I stopnia JM Rektora Politechniki Warszawskiej za działalność naukową w latach 2013-2014
- Nagroda Zespołowa I stopnia JM Rektora Politechniki Warszawskiej za działalność naukową w latach 2015-2016
- Nagroda Naukowa (indywidualna) I stopnia JM Rektora Politechniki Warszawskiej za działalność naukową w latach 2019-2020

Dane naukometryczne

1. Całkowity Impact Factor: 108.51, dla prac o których mowa w art. 219 ust. 1. pkt 2 Ustawy (H1-H13): 38.28 (wg Journal Citation Reports)
2. Całkowita liczba cytowań wszystkich publikacji: 443 (410 bez autocytowań), liczba cytowań prac o których mowa w art. 219 ust. 1. pkt 2 Ustawy (H1-H13): 250 (wg Web Of Science).
3. Index Hirsha: 10 (wg Web Of Science), 11 (wg Scopus)
4. Średnia liczba cytowań na pracę: 14.29 (wg Web Of Science)

Literatura

- [Anno 2017] Y. Anno, Y. Imakita, K. Takei, S. Akita and T. Arie, *2D Mater.* 4 (2017) 025019
- [Cai10] J. Cai, P. Ruffieux, R. Jaafar, M. Bieri et. al., (2010) *Nature* 466, 470–473.
- [Chab21] S. Chabi, Z. Guler, A. D. Benavidez and T. S. Lul, *Nanomaterials* (2021), 11, 1799.
- [Gia17] P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme, O. Bunau, M.B. Nardelli, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, M. Cococcioni, N. Colonna, I. Carnimeo, A.D. Corso, S. de Gironcoli, P. Delugas, R.A. DiStasio, A. Ferretti, A. Floris, G. Fratesi, G. Fugallo, R. Gebauer, U. Gerstmann, F. Giustino, T. Gorni, J. Jia, M. Kawamura, H.-Y. Ko, A. Kokalj, E. Küçükbenli, M. Lazzeri, M. Marsili, N. Marzari, F. Mauri, N.L. Nguyen, H.-V. Nguyen, A.O. de-la Roza, L. Paulatto, S. Ponc, D. Rocca, R. Sabatini, B. Santra, M. Schlipf, A.P. Seitsonen, A. Smogunov, I. Timrov, T. Thonhauser, P. Umari, N. Vast, X. Wu, S. Baroni, *J. Phys. Condens. Matter* (2017) 29 465901, <https://doi.org/10.1088/1361-648x/aa8f79>.
- [Ish91] T. Ishida and K. Iwamura, *J. Am. Chem. Soc.* (1991) 113, 4238–4241.
- [Jin09] Ch. Jin, , F. Lin, K. Suenaga, and S. Iijima *Phys. Rev. Lett.* (2009) 102, 195505.
- [Kim06] R. Kim, S. Datta and M. S. Lundstrom, *J. Appl. Phys.* (2009) 105, 034506
- [Lan57] R. Landauer, *IBM Journal of Research and Development* (1957) 1 (3): 223–231.
- [Mah00] G. Mahan, „Many Particle Physics”, wyd. Kluwer Academic, 2000.
- [Pat20] A. Patela, D. Singh, Y. Sonvane, P.B. Thakor and R. Ahuja, *Comp. Mat. Sci.* (2020) 183, 109913.
- [Sah09] H. Şahin, S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Bekaroglu, E. Akturk, R. T. Senger, and S. Ciraci, *Phys. Rev. B* (2009) 80, 155453
- [San97] D. Sanchez-Portal, P. Ordejon, E. Artacho, and J. M. Soler, *Int. J. Quantum Chem.* (1997) 65, 453.
- [Sin22] D. Singh and R. Ahuja, *Comput Mol Sci.* (2022) 12, 1547.
- [Ven01] R. Venkatasubramanian, E. Siivola, T. Colpitts and B.s O'Quinn, *Nature* (2001) 413, 120.
- [Wei09] P. Wei, W. Bao, Y. Pu, Chun, N. Lau, and J. Shi, *Phys. Rev. Lett.* (2009) 102, 166808.
- [Yang08] X. Y. Yang, X. Dou, A. Rouhanipour, L. J. Zhi, H. J. Rader, and K. J. Mullen, *Am. Chem. Soc.* (2008) 130, 4216.
- [Zuev09] Y.M. Zuev, W. Chang and P. Kim, *Phys. Rev. Lett.* (2009) 102, 096807.

Wykaz osiągnięć naukowych albo artystycznych, stanowiących znaczący rozwój określonej dyscypliny

I. WYKAZ OSIĄGNIĘĆ NAUKOWYCH ALBO ARTYSTYCZNYCH, o których mowa w art. 219 ust. 1. pkt 2 Ustawy

III.1 K. Zberecki, M. Wierzbicki, J. Barnaś, and R. Swirkowicz, „Thermoelectric effects in silicene nanoribbons”, Physica Review B 88, 115404 (2013), IF = 3.91

Wkład współautorów

K. Zberecki: obliczenia ab-initio, wyznaczenie współczynników termoelektrycznych, przygotowanie manuskryptu, dyskusja wyników i wnioski

M. Wierzbicki: wyznaczenie struktury fononowej silicenu w modelu 4NNFC, wyznaczenie wkładu fononowego do konduktancji termicznej, dyskusja otrzymanych wyników.

J. Barnaś: pomoc w interpretacji otrzymanych wyników numerycznych oraz pomoc w przygotowaniu końcowej wersji manuskryptu.

R. Swirkowicz: dyskusja otrzymanych wyników oraz przeczytanie i ocena wstępnej wersji manuskryptu.

III.2 K. Zberecki, R. Swirkowicz, and J. Barnaś, „Spin effects in thermoelectric properties of Al- and P-doped zigzag silicene nanoribbons”, Physica Review B, 89, 165419 (2014), IF = 3.91

Wkład współautorów

K. Zberecki: obliczenia ab-initio, wyznaczenie współczynników termoelektrycznych, przygotowanie manuskryptu, dyskusja wyników i wnioski

J. Barnaś: pomoc w interpretacji otrzymanych wyników numerycznych oraz pomoc w przygotowaniu końcowej wersji manuskryptu.

R. Swirkowicz: dyskusja otrzymanych wyników oraz przeczytanie i ocena wstępnej wersji manuskryptu

III.3 K. Zberecki, R. Swirkowicz, M. Wierzbicki and J. Barnaś, „Enhanced thermoelectric efficiency in ferromagnetic silicene nanoribbons terminated with hydrogen atoms”, Physical Chemistry Chemical Physics, 2014, 16, 12900, IF = 3.3

Wkład współautorów

K. Zberecki: obliczenia ab-initio, wyznaczenie współczynników termoelektrycznych, przygotowanie manuskryptu, dyskusja wyników i wnioski

M. Wierzbicki: wyznaczenie wkładu fononowego do konduktancji termicznej z modelu 4NNFC, dyskusja otrzymanych wyników.

J. Barnaś: pomoc w interpretacji otrzymanych wyników numerycznych oraz pomoc w przygotowaniu końcowej wersji manuskryptu.

R. Swirkowicz: dyskusja otrzymanych wyników oraz przeczytanie i ocena wstępnej wersji manuskryptu

III.4 K. Zberecki, R. Swirkowicz, J. Barnaś, „Thermoelectric properties of zigzag silicene nanoribbons doped with Co impurity atoms”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 393 (2015) 305–309, IF = 3.09

Wkład współautorów

K. Zberecki: obliczenia ab-initio, wyznaczenie współczynników termoelektrycznych, przygotowanie manuskryptu, dyskusja wyników i wnioski

J. Barnaś: pomoc w interpretacji otrzymanych wyników numerycznych oraz pomoc w przygotowaniu końcowej wersji manuskryptu.

R. Swirkowicz: dyskusja otrzymanych wyników oraz przeczytanie i ocena wstępnej wersji manuskryptu

III.5 K. Zberecki, R. Swirkowicz, J. Barnaś, „Thermoelectric Properties of Doped Zigzag Silicene Nanoribbons”, *Acta Physica Polonica A* 127, 2015 (Proceedings of the European Conference Physics of Magnetism, Poznań 2014), IF = 0.54

Wkład współautorów

K. Zberecki: obliczenia ab-initio, wyznaczenie współczynników termoelektrycznych, przygotowanie manuskryptu, dyskusja wyników i wnioski

J. Barnaś:

R. Swirkowicz: dyskusja otrzymanych wyników oraz przeczytanie i ocena wstępnej wersji manuskryptu

III.6 K. Zberecki, R. Swirkowicz, M. Wierzbicki and J. Barnaś, „Spin effects in thermoelectric phenomena in SiC nanoribbons”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2015, 17, 1925, , IF = 3.3

Wkład współautorów

K. Zberecki: obliczenia ab-initio, wyznaczenie współczynników termoelektrycznych, przygotowanie manuskryptu, dyskusja wyników i wnioski

M. Wierzbicki: wyznaczenie wkładu fononowego do konduktancji termicznej z obliczeń półklasycznych, dyskusja otrzymanych wyników.

J. Barnaś: pomoc w interpretacji otrzymanych wyników numerycznych oraz pomoc w przygotowaniu końcowej wersji manuskryptu.

R. Swirkowicz: dyskusja otrzymanych wyników oraz przeczytanie i ocena wstępnej wersji manuskryptu

III.7 K. Zberecki, R. Swirkowicz and J. Barnaś, „Boron nitride zigzag nanoribbons: optimal thermoelectric systems”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2015, 17, 22448, IF = 3.3

Wkład współautorów

K. Zberecki: obliczenia ab-initio, wyznaczenie współczynników termoelektrycznych, przygotowanie manuskryptu, dyskusja wyników i wnioski

J. Barnaś: pomoc w interpretacji otrzymanych wyników numerycznych oraz pomoc w przygotowaniu końcowej wersji manuskryptu.

R. Swirkowicz: dyskusja otrzymanych wyników oraz przeczytanie i ocena wstępnej wersji manuskryptu

III.8 K. Zberecki, R. Swirkowicz, M. Wierzbicki and J. Barnaś, „Spectacular enhancement of thermoelectric phenomena in chemically synthesized graphene nanoribbons with substitution atoms”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2016, 18, 18246, IF = 3.3

Wkład współautorów

K. Zberecki: obliczenia ab-initio, wyznaczenie współczynników termoelektrycznych, przygotowanie manuskryptu, dyskusja wyników i wnioski

M. Wierzbicki: wyznaczenie wkładu fononowego do konduktancji termicznej z modelu 4NNFC, dyskusja otrzymanych wyników.

J. Barnaś: pomoc w interpretacji otrzymanych wyników numerycznych oraz pomoc w przygotowaniu końcowej wersji manuskryptu.

R. Swirkowicz: dyskusja otrzymanych wyników oraz przeczytanie i ocena wstępnej wersji manuskryptu

III.9 K. Zberecki and R. Swirkowicz, „Thermoelectric phenomena in chemically synthesized graphene nanoribbons with substitution atoms and functional groups”, *Physica Status Solidi B* 253, No. 12, 2523–2527 (2016), IF = 1.78

Wkład współautorów

K. Zberecki: obliczenia ab-initio, wyznaczenie współczynników termoelektrycznych, przygotowanie manuskryptu, dyskusja wyników i wnioski

R. Swirkowicz: dyskusja otrzymanych wyników oraz przeczytanie i ocena wstępnej wersji manuskryptu

III.10 K Zberecki, M. Wierzbicki, R. Swirkowicz and J. Barnaś, „Unique magnetic and thermoelectric properties of chemically functionalized narrow carbon polymers”, *Journal of Physics: Condensed Matter* 29 (2017) 045303, IF = 2.7

Wkład współautorów

K. Zberecki: obliczenia ab-initio, wyznaczenie współczynników termoelektrycznych, przygotowanie manuskryptu, dyskusja wyników i wnioski

M. Wierzbicki: wyznaczenie wkładu fononowego do konduktancji termicznej z modelu 4NNFC, dyskusja otrzymanych wyników.

J. Barnaś: pomoc w interpretacji otrzymanych wyników numerycznych oraz pomoc w przygotowaniu końcowej wersji manuskryptu.

R. Swirkowicz: dyskusja otrzymanych wyników oraz przeczytanie i ocena wstępnej wersji manuskryptu

III.11 K. Zberecki and R. Swirkowicz, „Transport and thermoelectric properties of magnetic organic chains”, *Physica Status Solidi B* 254, No. 7, 1600783 (2017), IF = 1.78

Wkład współautorów

K. Zberecki: obliczenia ab-initio, wyznaczenie współczynników termoelektrycznych, przygotowanie manuskryptu, dyskusja wyników i wnioski

R. Swirkowicz: dyskusja otrzymanych wyników oraz przeczytanie i ocena wstępnej wersji manuskryptu

III.12 K. Zborecki and R. Swirkowicz, „Transport and Thermoelectric Properties of Magnetic Organic Structures”, Acta Physica Polonica A 133, 3 (Proceedings of the European Conference Physics of Magnetism, Poznań 2014) , IF=0.54

Wkład współautorów

K. Zborecki: obliczenia ab-initio, wyznaczenie współczynników termoelektrycznych, przygotowanie manuskryptu, dyskusja wyników i wnioski

R. Swirkowicz: dyskusja otrzymanych wyników oraz przeczytanie i ocena wstępnej wersji manuskryptu

III.13 K. Zborecki, „Silicene nanoribbons”, rozdział w monografii „Silicon Nanomaterials Sourcebook ”, K. Sattler (edytor), CRC Press 2018, ISBN-13: 978-1498763776

II. WYKAZ AKTYWNOŚCI NAUKOWEJ ALBO ARTYSTYCZNEJ (niewymienionych w pkt I)

1. K. Zborecki, P.H. Heenen, P. Magierski, „Nuclear tetrahedral configurations at spin zero”, Physical Review C, 79, 1, 014319, (2009), IF=3.13, 21 cytowań.

2. K. Zborecki, L. Adamowicz, M. Wierzbicki, „Ab initio prediction of half-metallic ferromagnetic metamaterials composed of alkali metals with nitrogen”, Physica Status Solidi B, 246(10), pp. 2270-2278 (2009), IF = 1.45, 9 cytowań

3. K. Zborecki, „Emergence of magnetism in doped two-dimensional honeycomb structures of III-V binary compounds”, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism 25(7), pp. 2533-2537 (2012), IF = 1.13, 10 cytowań

4. K. Zborecki, „Magnetism in doped two-dimensional honeycomb structures of III-V binary compounds”, Acta Physica Polonica A, 121(5-6), pp. 1240-1241 (2012), IF = 0.54, 1 cytowanie

5. K. Zborecki, M. Wilczynski, M. Wierzbicki, „Fourth order Heisenberg models with minimal number of parameters for two-dimensional magnetic crystals”, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, (2023) 568, 70385. IF=3.09, 0 cytowań

6. M. Wilczynski, K. Zborecki, M. Wierzbicki, „The spin-polarized tunnel current and the spin-transfer torque in triple-barrier junctions with external electrodes and quantum wells made of ferromagnetic materials”, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, (2023) 580, 170901. IF=3.09, 0 cytowań

7. A. Dużyńska, J. Judek, K. Wilczyński, K., Zborecki, A. Łapińska, A. Wróblewska, M. Zdrojek, „Temperature-induced phonon behavior in titanium disulfide (TiS₂) nanosheets”, Journal of Raman Spectroscopy 50, 8, pp. 1114-1119 (2019), IF = 2.80, 8 cytowań

8. K. Pięta, C. Jastrzebski, K. Zborecki, D. Jastrzebski, W. Paszkowicz, S. Podsiadło, „Synthesis and structural characterization of Ag₂ZnSnS₄ crystals”, Journal of Solid State Chemistry, (2020), 290, 121467, IF=3.66, 8 cytowań

9. J. Judek, P. Wróbel, P. Michałowski, M. Ozga, B. Witkowski, A. Seweryn, M. Struzik, C. Jastrzębski, **K. Zborecki**, „Titanium Nitride as a Plasmonic Material from Near-Ultraviolet to Very-Long-Wavelength Infrared Range” *Materials*, (2021), 14(22), 7095, IF=3.4, 8 cytowań
10. **K. Zborecki**, „Atomic and electronic properties of few-layer hexagonal boron”, *Solid State Communications*, (2020), 307, 113804, IF=1.93, 1 cytowanie
11. G. Matyszczyk, **K. Zborecki**, „Application of artificial neural network and global optimization techniques for high throughput modeling of the crystal structure of stannites and kesterites”, *Journal of Computational Chemistry*, (2021), 42(11), 740, IF=3.67, 5 cytowań
12. **K. Zborecki**, „Structure prediction of two-dimensional materials based on neural network-driven evolutionary technique”, *Computational Materials Science*, (2021), 186, 110046, IF=3.57, 0 cytowań
13. **K. Zborecki**, „Magnetic properties of two-dimensional M₂N₃ (M-metal, N=S,Se,Te) compounds”, nieopublikowane, preprint <https://arxiv.org/abs/2006.09757>
14. M. Bonilla, S. Kolekar, J. Li, Y. Xin, P. M. Coelho, K. Lasek, **K. Zborecki**, D. Lizzit, E. Tosi, P. Lacovig, S. Lizzit, M. Batzill, „Compositional Phase Change of Early Transition Metal Diselenide (VSe₂ and TiSe₂) Ultrathin Films by Postgrowth Annealing”, *Advanced Materials Interfaces*, (2020), 7(15), 2000497, IF=6.39, 11 cytowań
15. K. Lasek, P. M. Coelho, **K. Zborecki**, Y. Xin, S. K. Kolekar, J. Li, M. Batzill, „Molecular Beam Epitaxy of Transition Metal (Ti-, V-, and Cr-) Tellurides: From Monolayer Ditellurides to Multilayer Self-Intercalation Compounds”, *ACS Nano* (2020), 14, 7, 8473, IF=17.1, 51 cytowań
16. K. Lasek, P. M. Coelho, P. Gargiani, M. Valvidares, K. Mohseni, H. L. Meyerheim, I. Kostanovskiy, **K. Zborecki**, M. Batzill „Van der Waals epitaxy growth of 2D ferromagnetic Cr(1+δ)Te₂ nanolayers with concentration-tunable magnetic anisotropy”, *Applied Physics Reviews* (2022) 9, 011409, IF=15.0, 8 cytowań.

III. DANE NAUKOMETRYCZNE

1. Całkowity Impact Factor: 108.51, dla prac o których mowa w art. 219 ust. 1. pkt 2 Ustawy (H1-H13): 38.28 (wg Journal Citation Reports)
2. Całkowita liczba cytowań wszystkich publikacji: 443 (410 bez autocytowań), liczba cytowań prac o których mowa w art. 219 ust. 1. pkt 2 Ustawy (H1-H13): 250 (wg Web Of Science).
3. Index Hirsha: 10 (wg Web Of Science), 11 (wg Scopus)
4. Średnia liczba cytowań na pracę: 14.29 (wg Web Of Science)

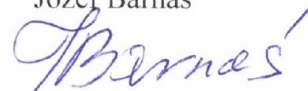
Prof. dr hab. Józef Barnaś
Wydział Fizyki
Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza
w Poznaniu

OŚWIADCZENIE

Oświadczam, że mój udział w publikacjach III.1 – III.8 oraz III.10 (których jestem współautorem), zawartych we wniosku habilitacyjnym dra Krzysztofa Zboreckiego, dotyczył pomocy w interpretacji wyników numerycznych oraz pomocy w przygotowaniu końcowej wersji manuskryptu.

Poznań, 4.09.2023

Józef Barnaś




Prof. dr hab. Renata Swirkowicz
Wydział Fizyki
Politechnika Warszawska

OŚWIADCZENIE

Oświadczam, iż w przypadku publikacji III.1 -III.12, zawartych we wniosku dra Krzysztofa Zboreckiego, których byłam współautorem, mój wkład ograniczał się do udziału w dyskusji otrzymanych wyników oraz przeczytania i oceny wstępnej wersji manuskryptu.

17.08.2023

.....
data



.....
podpis

OŚWIADCZENIE

Oświadczam, że mój wkład do publikacji III.1 - III.12, wymienionych we wniosku doktora Krzysztofa Zberekiego, był następujący:

- wyznaczenie współczynników termoelektrycznych (wkład fononowy do konduktancji termicznej) na podstawie obliczonej ab-initio struktury fononowej materiału,
- wyznaczenie struktury fononowej silicenu w modelu 4NNFC,
- dyskusja otrzymanych wyników

WienGiac

dr hab. inż. Michał Wierzbicki
Wydział Fizyki
Politechnika Warszawska

