

Prof. dr hab. inż. Vitalii Dugaev  
Wydział Matematyki i Fizyki Stosowanej  
Politechnika Rzeszowska  
Al. Powstańców Warszawy 6  
35-959 Rzeszów

Rzeszów, 15 listopada 2018

## **Recenzja rozprawy habilitacyjnej oraz dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego dr. Bartłomieja Wiendlochy**

Dr. Bartłomiej Wiendlocha ukończył studia na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie w roku 2004 i otrzymał dyplom magisterski z wyróżnieniem. Pracę doktorską wykonał na tym samym wydziale AGH w roku 2009. Doktorat Pana Bartłomieja Wiendlochy został także wyróżniony. Od 2008 Pan Wiendlocha pracował na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH, natomiast w latach 2011, 2012 i 2014 pracował jako postdoc na Uniwersytecie Ohio w Stanach Zjednoczonych. Właśnie prace wykonane we współpracy z profesorem J. Heremanssem z Uniwersytetu Ohio stanowią najważniejszą część dorobku Pana dr Bartłomieja Wiendlochy, przedstawionego jako podstawa postępowania habilitacyjnego (11 artykułów w wysoko punktowanych czasopiśmie z listy filadelfijskiej oraz 1 rozdział w monografii wieloautorskiej, opublikowanej znanym wydawnictwem CRC Press w Stanach Zjednoczonych). Warto zaznaczyć, że 3 z tych prac zostały opublikowane w czasopiśmie „Energy & Environmental Science”, które teraz ma bardzo wysoki impact factor (25,4 w roku 2015).

Całkowity dorobek dr Wiendlochy – to 37 publikacji, w tym z bazy Web of Science – 33, przy tym liczba cytowań 694 i indeks Hirscha 12.

Uważam, że wszystkie wyżej przedstawione dane charakteryzują dość imponujący dorobek, który na pewno pozwala Panu Bartłomiejowi Wiendlocha wystąpić o przyznanie habilitacji.

### Rozprawa habilitacyjna

Dla postępowania habilitacyjnego zostało wybranych 12 prac na temat właściwości termoelektrycznych materiałów półprzewodnikowych typu IV-VI, takich jak PbTe, PbTeSe i PbS z domieszkami, które tworzą poziomy rezonansowe w strukturze elektronowej półprzewodników z wąską przerwą energetyczną. Uważam, że jest to bardzo dobry wybór ponieważ przedmiot badań w zakresie przetwarzania energii jest teraz nadzwyczaj aktualny. Świadczy o tym ilość cytowań pracy prof. Heremansa i in. na ten temat, opublikowanej w czasopiśmie Science w roku 2008 (1750 cytowań według bazy Web of Science).

Wiadomo, że półprzewodniki typu PbTe i PbTeSe charakteryzują się wysokimi parametrami współczynnika siły termoelektrycznej  $S$  oraz współczynnika dobroci termoelektrycznej  $zT$  (figure of merit). Okazało się, że wprowadzenie domieszek rezonansowych może znacznie podnieść wartości tych parametrów. W związku z tym półprzewodniki z domieszkami rezonansowymi są teraz bardzo perspektywne w przypadku zastosowań, w tym podniesienia jakości generatorów prądu i chłodziarek termoelektrycznych różnych rodzajów i w różnych przedziałach temperatury.

We wszystkich przedstawionych do habilitacji pracach Pan dr Wiendlocha wykonywał symulacje komputerowe korzystając z kodów obliczeniowych stworzonych w AGH, na Uniwersytecie w

Monachium (dobrze znane kody pochodzą z grupy prof. H. Eberta) oraz dobrze znany kod Wien2K z Uniwersytetu w Wiedniu. Metody obliczeniowe zaimplementowane w tych kodach to DFT, KKR-CPA, LAPW i inne.

[H1] Praca, w której przedstawiono wyniki doświadczalne dla wartości termosiły i współczynnika dobroci  $zT$  w kryształach PbTe, PbTeSe i PbTeS z domieszką TI oraz obliczenia komputerowe gęstości stanów elektronowych w tych materiałach. Głównym wynikiem pracy jest to, że przez optymalizację parametrów materiału domieszkowaniem TI i zmianą składu udało się osiągnąć dość wysoką wartość współczynnika  $zT$ : rzędu 1.6 w temperaturze  $T = 700\text{K}$ . W tym przypadku atomy TI wpływają głównie na zmianę gęstości stanów w pasmie przewodnictwa, ale nie powstaje dyskretny poziom jak dla stanu zlokalizowanego. Autorzy twierdzą, że stan rezonansowy istnieje we wszystkich badanych materiałach. Wysoka wartość parametru  $zT$  najprawdopodobniej jest związana z rozpraszaniem fononów na domieszkach, co powoduje znaczne zmniejszenie przewodnictwa cieplnego.

[H2] W tej pracy pokazane zostały wyniki obliczeń gęstości stanów dla Bi domieszkowanego litem, z których wynika, że w przypadku, gdy atom Li podstawia Bi, tworzy się stan rezonansowy. Natomiast dla Li w pozycji międzywęzłowej wpływ tej domieszki polega jedynie na zmianie koncentracji nośników ponieważ Li jest donorem.

[H3] Praca nosi głównie charakter pracy przeglądowej, ale zostały w niej także przedstawione wyniki analizy teoretycznej dla termosiły, oparte na obliczeniu gęstości stanów w półprzewodnikach PbTe z domieszkami rezonansowymi. Zależność  $n(E)$  dla PbTe z domieszką TI i Ti została obliczona metodą *ab initio*, natomiast dla przewodnictwa i termosiły zostały wykorzystane wzory standardowe z teorii półprzewodników jednopasmowych z paraboliczną zależnością energii od wektora falowego  $k$ . Wyniki badań eksperymentalnych termosiły  $S$ , przedstawione w tej samej pracy są zgodne z analizą teoretyczną.

[H4] W tej pracy dr Wiendlocha występuje jako jedyny autor i przedstawia wyniki obliczenia funkcji spektralnej w półprzewodniku PbTe z domieszką rezonansową TI. Wiadomo, że funkcja spektralna  $A(k, E)$  daje możliwość znalezienia charakterystycznego czasu relaksacji elektronu w pewnym stanie z wektorem falowym  $k$  i energią  $E$ . Przedstawione obliczenia pokazały, że dla domieszki TI przy koncentracji  $x = 0.02$  szerokość rozmycia stanu rezonansowego jest dość duża i nie jest możliwe zaobserwowanie pojedynczych pików gęstości stanów na tle pasma walencyjnego.

To jest bardzo ciekawy wynik, chociaż dla mnie osobiście samo wykorzystanie metody CPA dla obliczenia gęstości stanów, związanej z domieszką przy niskich koncentracjach domieszek nie jest dobrze uzasadnione (ta moja uwaga faktycznie dotyczy wszystkich prac z wykorzystaniem CPA dla domieszkowanych półprzewodników). Problem jest w tym, że CPA jest pewnym przybliżeniem podobnym do przybliżenia średniego pola, które jest poprawne dla opisu stanów elektronowych w kryształach mieszanych (stopach), ale nie dla domieszek w półprzewodnikach. Faktycznie, fluktuacje pola domieszek mogą być bardzo istotne. Na przykład, fluktuacje powodują istnienie ogonów gęstości stanów oraz prowadzą do zjawiska lokalizacji. Trzeba jednak zaznaczyć, że położenie pików gęstości stanów, który odpowiada stanowi rezonansowemu, obliczone w CPA, jest prawidłowe ponieważ zgadza się z położeniem poziomu dla stanu pojedynczej domieszki.

[H5] W tej teoretycznej pracy zostały przedstawione wyniki obliczeń funkcji spektralnej w zależności od gęstości stanów dla PbTe z 2% domieszki TI albo Ti. Ciekawą obserwacją jest to, że dla TI tworzy się stan rezonansowy, tzn. stan na tle pasma walencyjnego, natomiast dla domieszki Ti stan jest raczej stanem zlokalizowanym w przerwie energetycznej (uważam, że stany zlokalizowane, które znajdują się w przerwie energetycznej, nie mogą być nazywane stanami rezonansowymi).

[H6] Praca teoretyczno-doświadczalna we współpracy z grupą doświadczalników. Przedstawione w niej zostały badania struktury elektronowej oraz właściwości termoelektrycznych w  $Mg_2Sn$  i  $Mg_2Sn_{1-x}Si_x$  z domieszkami srebra. Zarówno wyniki doświadczalne tak i obliczenia *ab initio* wykazały, że Ag, który jest regularnym akceptorem w tych materiałach, nie prowadzi do stanu rezonansowego.

[H7] Praca doświadczalno-teoretyczna, gdzie są przedstawione wyniki poszukiwań domieszek rezonansowych w kryształach Bi i Bi-Sb, które służą do zastosowań jako chłodziarki w bardzo niskich temperaturach. W tej pracy została badana możliwość wykorzystania domieszki indu jako domieszki rezonansowej. W wyniku badań okazało się, że domieszka indu tworzy głęboki stan rezonansowy. Najciekawszym wynikiem jest to, że domieszka indu działa jako akceptor, ale przy tym, jak twierdzą autorzy, praktycznie nie wpływa na elektrony pasma walencyjnego czyli dla elektronów przewodnictwa domieszka indu jest elektrycznie obojętną. Ten wynik jest bardzo niezwykły i ciekawy, chociaż nie jestem pewny, czy fizyka tego zjawiska została w tej pracy ostatecznie wyjaśniona: jak widać, zaburzenie stanów elektronowych pasma walencyjnego odbywa się przy energiach elektronów w pobliżu energii Fermiego, czyli bardzo daleko od rezonansu. Jest to ważne dla termoelektryki ponieważ domieszki obojętne słabo wpływają na przewodnictwo.

[H8] Przeglądowa praca czterech autorów, w której zostały przedstawione najważniejsze wyniki obliczeń struktury elektronowej niektórych materiałów termoelektrycznych. Przedstawione zostały zależności gęstości stanów od energii w  $Bi_2Te_3$  z Ni i Cu, SnTe z domieszką In, PbTe z domieszkami Tl i Ti i in. Wyniki obliczeń pokazują możliwość istnienia stanów rezonansowych w tych materiałach.

[H9] Praca teoretyczna dr Wiendlochy bez współautorów, w której bardzo szczegółowo zostały przeanalizowane wyniki obliczeń gęstości stanów w materiałach termoelektrycznych  $Bi_2Te_3$ ,  $Bi_2Te_2Se$  i  $Bi_2Se_3$  z domieszkami Sn. W tej pracy pokazano nie tylko istnienie stanu rezonansowego, ale także zależność położenia pików rezonansowych w zależności od składu stopów oraz od koncentracji wakansji i innych domieszek przy podwójnym domieszkowaniu.

[H10] Rozdział w monografii wieloautorskiej, poświęconej materiałom termoelektrycznym. Uważam, że to jest bardzo prestiżowa monografia, w której zostały przedstawione najważniejsze osiągnięcia w dziedzinie termoelektryki. Rozdział o materiałach z domieszkami rezonansowymi opisuje wyniki dla Bi i stopów BiSb domieszkowanych potasem. W wymienionym rozdziale zostały przedstawione także wyniki doświadczalne z Bi-Sb domieszkowany potasem. Okazało się, że w niektórych próbkach współczynnik  $zT$  jest bardzo wysoki, co jest związane ze stanem rezonansowym dla domieszki K na tle pasma walencyjnego.

[11] Praca wykonana została we współpracy z grupą doświadczalną prof. Lenoir ze Francji. Jej celem było wyjaśnienie możliwości istnienia stanów rezonansowych w  $As_2Te$  domieszkowanym Sn. Okazało się, że stan rezonansowy istnieje w pobliżu krawędzi pasma walencyjnego. Ponadto, zostały tam przedstawione wyniki obliczenia przewodnictwa, przewodnictwa Halla oraz termosity w przybliżeniu równania Boltzmanna (przy tym został wykorzystany kod „BoltzTraP”). Niestety, przy obliczeniu zjawisk transportowych rozpraszanie na domieszkach rezonansowych nie zostało uwzględnione, a czas relaksacji nośników był wzięty jako niezależny od energii. Oczywiście, to jest pewnym przybliżeniem.

[12] Samodzielna praca dr Wiendlochy, w której zostały opisane obliczenia termosity w materiałach termoelektrycznych PbTe z domieszkami Tl i Na oraz  $Cu_{1-x}Ni_x$ . Celem tej pracy było wyjaśnienie związku między domieszkowaniem, które prowadzi do stanów rezonansowych, z wartością termosity w badanych materiałach. W pracy zostały przedstawione wyniki obliczeń gęstości stanów, funkcji spektralnej oraz charakterystyki transportowe (przewodnictwo, czas relaksacji, wartość termosity). Dla obliczeń transportowych był wykorzystany kod „SPRKKR”, który jest połączeniem metody KKR-CPA i

formalizmu Kubo. Moim zdaniem, bardzo ważnym wynikiem jest to, że autor przeanalizował niektóre z możliwych niedokładności wyników, które mogą być związane z wykorzystaną metodą obliczeniową.

W podsumowaniu do tych wszystkich prac przedstawiono 4 najważniejsze (z punktu widzenia Pana dr Wiendlocha) wyniki: (1) domieszka, uważana jako rezonansowa, nie zawsze prowadzi do stanu rezonansowego na tle pasma energetycznego i, ponadto, może tworzyć rezonans w energii daleko od krawędzi pasma i poziomu Fermiego; (2) zapostulowano możliwość istnienia stanów rezonansowych w Bi-Sb; (3) jako nowy mechanizm domieszkowania zostało przedstawione istnienie głębokich stanów rezonansowych bez istotnego zaburzenia struktury elektronowej w energii, która wyznacza właściwości transportowe; (4) został teoretycznie potwierdzony mechanizm wzrostu termosiły w PbTe z domieszką TI.

#### Pozostały dorobek naukowy

Dr Wiendlocha posiada dość znaczący dorobek prac, który nie zostały włączone do najważniejszych do oceny pracy habilitacyjnej. To są prace na temat termoelektryki i materiałów termoelektrycznych (5 prac w czasopismach z listy filadelfijskiej oraz 1 rozdział w monografii), nadprzewodnictwa (15 prac) oraz materiałów magnetycznych i magneto-kalorymetrycznych. Faktycznie te prace także stanowią dość imponujący dorobek, który świadczy, że dr Wiendlocha naprawdę jest doświadczonym naukowcem.

#### Dorobek dydaktyczny i organizacyjny

Od roku 2004 dr Wiendlocha prowadził zajęcia ćwiczeniowe i laboratoryjne z informatyki i ćwiczenia rachunkowe dla studentów i doktorantów oraz prowadził 1 wykład monograficzny z fizyki współczesnej na Wydziale Fizyki i Informatyki stosowanej AGH w Krakowie.

#### Podsumowanie

Uważam, że dr Wiendoch spełnia wszystkie niezbędne warunki postawione dla uzyskania stopnia doktora habilitowanego. Jego dorobek jest wystarczający. Wyniki prac zostały opublikowane w wysoko punktowanych czasopismach. Dla mnie jest oczywiste, że w większości prac wkład Pana Wiendlochy był kluczowy. W niektórych z najważniejszych opublikowanych prac teoretycznych Pan dr Wiendlocha jest jedynym autorem. Indeks Hirscha jest dość wysoki ( $H = 12$ ). Pan Wiendlocha prowadzi od lat zajęcia dydaktyczne. Wobec istotnych osiągnięć naukowych oraz prezentowanej dojrzałości z przekonaniem wnioskuję o nadanie doktorowi Bartłomiejowi Wiendlocha stopnia doktora habilitowanego.



Prof. dr hab. inż. Vitalii Dugaev