

dr hab. Jerzy Goraus, prof. UŚ
Instytut Fizyki im. Augusta Chełkowskiego
Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych
Uniwersytet Śląski
75 Pułku Piechoty 1a
41-500 Chorzów
Email: jerzy.goraus@us.edu.pl

Chorzów, 17 lipca 2024

**Recenzja pracy doktorskiej mgr Kai Bilińskiej
pt. „Study of Thermoelectric Properties of Half-Heusler Phases: ab initio
and Machine Learning Analysis”**

Praca doktorska mgr Kai Bilińskiej pt. „Study of Thermoelectric Properties of Half-Heusler Phases: ab initio and Machine Learning Analysis” powstała w Instytucie Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego Polskiej Akademii Nauk we Wrocławiu, a promotorem jest dr hab. Maciej Janusz Winiarski.

Autorka przebadła ponad 150 związków (dokładnie: 153) o strukturze stopów Heuslera w których jedna z podsięci jest pusta. Związki o takiej strukturze są określane w literaturze angielskiej jako semi-Heusler lub half-Heusler compounds, autorka w swojej pracy zastosowała skrót hH dla tych materiałów, zostanie on również użyty w niniejszej recenzji. Praca doktorska ma charakter teoretyczny, a badania polegały na wykonaniu obliczeń struktury elektronowej kodem VASP. Brak tu systematycznych porównań do innych metod za wyjątkiem odniesień do wcześniejszych publikacji autorki dla kilku materiałów, gdzie prowadzono obliczenia metodą LAPW. Brak również ściślejszych refleksji nad użytymi pseudopotencjałami. Badania doktorantki koncentrowały się na określeniu interesujących fizycznie właściwości takich jak:

- Szerokość przerwy energetycznej na poziomie Fermiego, czyli określenie czy materiał ma właściwości metalu, półprzewodnika czy izolatora. Prowadząc obliczenia spinowo spolaryzowane można określić również właściwości magnetyczne i zidentyfikować materiały takie jak półmetaliczne ferromagnetyki czy spinowo spolaryzowane półprzewodniki z zerową przerwą energetyczną. Używano tutaj potencjałów wymiennie-korelacyjnych GGA oraz mBJ.
- Określenia struktury pasmowej, która pozwala podejrzewać istnienie stanu izolatora topologicznego. Autorka w dalszej części pracy sugeruje, że niektóre materiały mają charakter izolatora topologicznego, moim zdaniem bez wystarczającego uzasadnienia. Czy i w jaki sposób był wyznaczany indeks Z_2 ? Prosiłbym o wyjaśnienie w jaki sposób takie analizy w oparciu o obliczenia autorki mogłyby być przeprowadzone, gdyż uzasadnienie że proponowane w punkcie 2.6 materiały są izolatorami topologicznymi wydaje mi się mieć słabe podstawy. Dobrze byłoby wyjaśnić czy VASP posiada takie możliwości wbudowane w kod lub ewentualnie jakie narzędzia potrzebne byłyby do postprocessingu aby te informacje uzyskać.

- Parametry elastyczne oraz równowagowy parametr sieciowy. Oszacowano również stabilność związków z kryterium Borna oraz przez porównanie z bazą OQMD. Nie jest jasne, czy autorka te porównania prowadziła używając po prostu strony projektu OQMD, czy też jakieś dodatkowe obliczenia w oparciu o metodologię zastosowaną w projekcie OQMD były prowadzone. Wiadomo, że dane na stronach tego projektu nie zawsze muszą się pokrywać z eksperymentalną rzeczywistością, np. autor recenzji sam wytworzył kilka materiałów które wg. tego projektu nie powinny istnieć (związki typu Ti_2MnAl). Z drugiej strony nowe dane na stronie projektu OQMD są szybko uwzględniane i korygowane, o czym autor recenzji sam się również przekonał.
- Ze struktury pasmowej można również określić czy mamy do czynienia z przerwą prostą czy skośną w przypadku półprzewodnika. Co było podstawą wybrania określonych ścieżek w przestrzeni odwrotnej dla których pokazano pasma na rysunkach 2.1, 2.4, 2.6 i 3.3?
- Termosiła, masa efektywna, relaksacyjny czas życia nośników. Na tych parametrach było skupione zainteresowanie autorki, co odzwierciedla sam tytuł pracy. Termosiła jest bardzo wrażliwa na określenie położenia poziomu Fermiego. Często w artykułach pokazuje się zależność termosiły od położenia poziomu Fermiego aby dać wyobrażenie jak bardzo jest ona wrażliwa. Przepuszczalnie dla ponad 150 związków trudno byłoby zawrzeć takie porównanie, ale dla związków o największej termosile, myślę że byłoby warto (duża termosiła wiąże się z dużym nachyleniem wykresu gęstości stanów w pobliżu poziomu Fermiego, a co za tym idzie dla tych materiałów czułość byłaby największa). Położenie poziomu Fermiego bardzo też będzie zależać od np. zastosowania dodatkowych korelacji Coulombowskich i od konkretnych wartości oraz sposobu ich uwzględniania (ang. Around Mean Field vs. Fully Localized Limit). W seryjnych obliczeniach o które oparty jest projekt AFLOW użyto parametrów zawartych w pracy Phys. Rev. X 1, 021012 (2011). Czy tutaj użyto LSDA+U, a jeżeli nie to dlaczego?
- Przewodność cieplną. Składnik fononowy został tu przybliżony dość starym modelem Slacka, opartym o parametry elastyczne. Czy brany był pod uwagę przyczynek elektronowy (z programu Boltztrap2)? Istnieją kody pozwalające określić fononowy przyczynek do przewodności cieplnej z równania Boltzmanna (ShengBTE) w analogiczny sposób jak robi się to dla elektronowego składnika programem Boltztrap2. Oczywiście dla ponad 150 związków nie ma to sensu. Jednak dla wybranych, najbardziej obiecujących materiałów zakładając dostęp do wydajnego klastra obliczeniowego wydaje mi się że miałyby to sens.

Na podstawie wyników obliczeń ab-initio wytrenowano model oparty o technikę regresyjną SVR i porównano wyniki. Ten element pracy wydaje mi się najbardziej nowatorski. Na wielu zaprezentowanych wykresach obrazujących obliczone z pierwszych zasad parametry wymienione wyżej i te przewidziane przez regresyjny model AI widać, że część zbiorów danych układa się dość dobrze na linii prostej co świadczy o możliwość szybkiego przewidywania, czy raczej lepszym słowem byłoby tutaj oszacowania właściwości badanych materiałów bez żmudnych i kosztownych czasowo oraz energetycznie obliczeń ab-initio. Z drugiej strony, zwykle koło położony danych zupełnie odstaje. Według mnie przyczyną takiego stanu rzeczy jest nie uwzględnienie korelacji w obliczeniach ab-initio lub też użycie niewłaściwych parametrów. Ponadto tam gdzie brana pod uwagę jest ilość elektronów powinno się ją brać w sposób bardziej dostosowany do danej klasy materiału. Przecież wiadomo, że te same pierwiastki mogą tworzyć różne związki chemiczne na różnych stopniach utleniania (np. tlenki metali przejściowych), więc samo przyjęcie że w każdym materiale dany pierwiastek zachowuje się tak samo jest błędne. Na takich danych model regresyjny nie może znaleźć właściwej zależności. Konieczne byłyby dodatkowe parametry różnicujące pierwiastki oparte o pewne heurystyczne reguły.

Praca doktorska ma formę zwartą (czyli nie jest tzw. zszywką publikacji) ma 135 stron i 296 referencji literaturowych. Jest napisana w języku angielskim. W streszczeniu zdefiniowano jej cel jako zbadanie właściwości termoelektrycznych ponad 150 różnych związków międzymetalicznych o strukturze stopu Heuslera, a konkretnie tzw. pół Heuslera czyli materiału w którym jedna z podsiatek pozostaje nieobsadzona. Wybrano do rozważań materiały które mają 18 elektronów walencyjnych. Spośród tych 150 związków tylko 34 zostały określone jako termodynamicznie stabilne. Spośród nich 120 było półprzewodnikami.

Ponadto spróbowano użyć jednej z technik uczenia maszynowego – tzw. metody wektorów wektorów nośnych w wersji dającej na wyjściu parametr ciągły w celu przewidzenia wyjściowych parametrów, które wcześniej uzyskiwano z obliczeń DFT. Po streszczeniu znajduje się spis publikacji stanowiących bazę pracy doktorskiej (5 pozycji) oraz wystąpień konferencyjnych (2 postery na konferencji w Szczyrku i jeden na konferencji we Wrocławiu) oraz lista użytych w pracy doktorskiej skrótów.

Praca składa się z pięciu rozdziałów i trzech dodatków.

- Pierwszy rozdział to obszerny wstęp teoretyczny zawierający opis celu pracy oraz procesu badawczego, opis materiałów hH, opis metod ab-initio i podstaw teorii funkcjonału gęstości (DFT), opis materiałów termoelektrycznych a także opis użytej w pracy metody uczenia maszynowego - metody wektorów nośnych. Dostyć dokładnie opisano specyfikę użytych metod - teorii DFT oraz kwestie istotne dla wyjaśnienia właściwości termoelektrycznych takie jak równanie transportu Boltzmanna czy model Drudego. Wstęp ma 26 stron. W całej pracy bardzo mało informacji o uporządkowaniu magnetycznym badanych materiałów. Ponieważ podpowłoki elektronowe dla 18 elektronowego hH są w pełni obsadzone zwykle przyjmuje się, że takie hH nie mają właściwości magnetycznych, ale w tekście pracy nie jest to odpowiednio wyjaśnione. Nie ma też wyjaśnionej reguły Slatera-Paulinga. Czy nieporządek mógłby powodować w takim materiale pojawienie się momentu magnetycznego i czy taka nieuporządkowana struktura mogłaby mieć mniejszą energię tworzenia komórki elementarnej? Dość interesujące w kontekście najnowszych badań są tzw. podwójne związki Heuslera powstające z dwóch bazowych komórek mających 17 i 19 elektronów przewodnictwa. Czy były prowadzone jakieś badania takich materiałów z podstawieniem aliowalენტnym ?

Jak już wspomniałem we wstępie autorka opisuje podstawy teorii DFT. Moją uwagę zwróciło równanie 1.6 i jego opis. Pomijając kwestię błędu edytorskiego w zapisie sprzężenia – jedną z podstawowych zalet DFT w stosunku do innych, zwłaszcza wcześniejszych metod jest możliwość użycia jednoelektronowych funkcji falowych, autorka tutaj mówiąc o gęstości elektronowej i o funkcjach używanych w DFT ma we wzorze 1.6 funkcje zależne od wszystkich położenia elektronów (jak rozumiem od $3N$ zmiennych). Prosiłbym o dokładniejsze wyjaśnienie co tutaj autorka miała na myśli i jak rozumieć ten wzór w kontekście DFT. W sekcji w której opisywana jest metoda LAPW zostało napisane że wewnątrz sfery MT (muffin-tin) nośniki (o jakie nośniki ładunku poza elektronami chodzi?) są opisywane przez harmoniki sferyczne, a na zewnątrz przez fale płaskie. Poniżej jednak, jest zamieszczony wzór 1.12 który pokazuje że sprawa nie jest taka prosta. Wewnątrz sfery MT jest to suma iloczynów harmonik sferycznych przez sumę funkcji radialnych i jej pochodnych, tak jak we wzorze 1.12. Dla metali przejściowych konieczne jest również uwzględnienie lokalnych orbitali. W rzeczywistości metoda LAPW wcale nie jest obecnie tak często stosowana, zwykle kody do obliczeń struktury elektronowej używają do niektórych pierwiastków LAPW+LO a do innych APW+lo (do elektronów d i f). Na stronie projektu Wien2K można ściągnąć za darmo plik z książką pt. „Density Functional Theory and the Family of (L)APW-methods: a step-by-step introduction” autorstwa Stefaana Cotteniera, gdzie podstawy teorii DFT oraz metod opartych o APW/LAPW są przystępnie wyjaśnione. Metoda LAPW była przez autorkę wykorzystywana w jej artykułach, które nie są uwzględnione jako stanowiące podstawę pracy doktorskiej, natomiast artykuły i badania opisane w pracy zostały uzyskane kodem VASP przy użyciu metody fal płaskich i pseudopotencjałów PAW. Dziwi więc poświęcenie we wstępie dwóch stron tekstu na metodę LAPW i ledwo kilku linijek na metodę PW/PAW będącą podstawą wszystkich wyników zamieszczonych w pracy doktorskiej. Opis procedury tworzenia pseudopotencjałów, ich ograniczeń (np. dla cięższych pierwiastków), sprawdzania poprawności wyników z metodami pełnopotencjałowymi powinien być zdecydowanie bardziej rozbudowany. Pseudopotencjały tworzy się zwykle przy określonych założeniach (porównując dane dla pierwiastków), które być może nie są spełnione dla związków chemicznych w których ma miejsce transfer ładunku. Szczególnie dla masowych i seryjnych obliczeń, może być tak że użycie metod pseudopotencjałowych jest źródłem pewnych błędów. Zaletą metod opartych o fale płaskie i pseudopotencjały jest ich szybkość wynikająca z prostej bazy funkcyjnej i możliwości użycia wydajnych algorytmów (np. FFT) oraz co chyba najbardziej istotne łatwość zrównoleglenia obliczeń na komputerach, które nie mają wspólnej pamięci. Metody takie jak LAPW zrównoleglają się dużo gorzej. Rozumiem użycie VASP

i metod opartych o fale płaskie do złożonych układów, które są zbyt kosztowne obliczeniowo dla innych metod. Stopy Heuslera to jednak jedne z najprostszych materiałów, obliczenia metodami pełnopotencjałowymi dla bazowej komórki elementarnej zachowującej symetrię (grupa 216 lub 225) na pojedynczym współczesnym komputerze trwają kilka do maksymalnie kilkudziesięciu minut. Nie ma tu zatem konieczności używania metod PW, przy których ich zalety nie mają się szansy ujawnić. Oczywiście sytuacja byłaby inna, gdyby badano niższą symetrię układu (np. nieporządek) lub superkomórki, tak jak dzieje się to dla obliczeń fononowych. Podkreślę jeszcze raz, że w pracy brakuje systematycznego porównania wyników uzyskanych z kodu VASP metodą PW z wynikami uzyskanymi z metod pełnopotencjałowych, które zwłaszcza dla cięższych pierwiastków bloku d i f powinno mieć miejsce.

- Drugi rozdział dotyczy struktury elektronowej badanych materiałów. Podano parametry numeryczne użyte podczas obliczeń oraz zawarto rozważania dotyczące stabilności badanych materiałów w oparciu o kryterium Born'a oraz dane projektu OQMD. Następnie pokazano dla potencjalnie stabilnych materiałów wykresy struktury pasmowej wzdłuż arbitralnie wybranej ścieżki (nie uzasadniono dlaczego wybrano akurat tą ścieżkę). Określono przerwy energetyczne dla potencjałów GGA oraz mBJ. Zasugerowano również, że kilka materiałów może mieć charakter izolatorów topologicznych. Podobnie jak pozostałe rozdziały za wyjątkiem wstępu ten rozdział kończy się również krótkim podsumowaniem. W podsumowaniu zauważono, że szerokość przerwy jest związana z masą atomową atomów X i Y w strukturze XYZ odwrotną zależnością. Nie zastanawiano się w pracy jednak głębiej co jest tego przyczyną. Rozdział ma 13 stron.
- Trzeci rozdział poświęcony jest własnościom termoelektrycznym badanych materiałów i ma 23 strony. Na początku opisano w nim procedurę określania sieciowego składnika przewodności cieplnej w oparciu o parametry elastyczne (tzw. metoda Slack'a). Nie użyto tu więc równania transportu Boltzmana dla fononów (jak można to zrobić np. programem ShengBTE). Użyta procedura ilustruje rysunek 3.1, w obrębie którego nie wyjaśniono wszystkich użytych zmiennych, np. co to jest δ lub \bar{M} .
Wyznaczono relaksacyjny czas życia nośników oraz masę efektywną potrzebną do jego określenia. Te rozważania prowadzono z użyciem potencjału deformacji, który określa jak bardzo zmienia się struktura pasmowa wraz ze zmianą rozmiaru komórki. Można odnieść wrażenie, że do określenia parametrów termoelektrycznych ZT brano jedynie sieciowy przyczynęk, a nie brano elektronowego bezpośrednio z programu Boltztrap. Uzyskane wartości ZT były bardzo niewielkie.
- Czwarty rozdział opisuje wyniki uzyskane z metody uczenia maszynowego, gdzie porównywane są wyniki z obliczeń DFT i wyniki przewidywań modelu regresyjnego nauczonego na wynikach DFT. Jako cele przewidywań modelu regresyjnego zdefiniowano: równowagowy parametr sieciowy, moduł sztywności, przerwę energetyczną (dla potencjałów GGA i mBJ) oraz fononowy składnik przewodności cieplnej. Jako dane wejściowe modelu (predyktory) zdefiniowano masę atomową, promień atomowy, masę molową, gęstość, elektrojemność, temperaturę Debye, przewodność cieplną, energie jonizacji oraz ilość elektronów walencyjnych. Użyto ponad 2000 różnych kombinacji predyktorów, a uwzględniając osobno dane dla każdego pierwiastka dawało to od 3 do 33 wymiarów.
- Piąty, bardzo krótki rozdział poświęcony jest zastosowaniu metody SVR do przewidywania wskaźnika PF (ang. Power Factor) charakteryzującego dany materiał termoelektryczny. Tutaj użyto jako predyktor 11 parametrów na każdy pierwiastek (czyli w sumie 33 predyktory).

Pracę kończą 3 dodatki: dodatek A zawierający dwie tablice, jedną z szerokością przerwy energetycznej dla badanych półprzewodników oraz drugą zawierającą entalpię tworzenia (z projektu OQMD) dla badanych materiałów; dodatek B zawierający validację danych dla 4 wybranych związków oraz dodatek C gdzie opisano jak szacowano masę efektywną.

Validacja (dodatek B.1) dla tylko czterech (YNiSn, YPdSb, LuNiSb, LuPdSb) z 153 rozważanych materiałów względem obliczeń LAPW wydaje mi się niewystarczająca. Tablica jest zresztą dość niejasna, spodziewałbym się danych pochodzących z metody PW i LAPW w sąsiednich kolumnach aby można je było łatwo porównać. Różnica parametru sieciowego rzędu

0.28 Å dla YNiSb i modułu sztywności 47.05 GPa dla YPdSb wskazuje że te dane z obydwu metod się nie pokrywają. Różnica oszacowania modułu sztywności rzędu 47 GPa dla materiału który ma moduł sztywności około 90 GPa nie wydaje się recenzentowi szczególnie mała - świadczy o radykalnie źle oszacowanym parametrze sieciowym. Zresztą różnica 0.28 Å dla materiału o parametrze sieciowym 6.35 Å też jest znaczna. Być może takich różnic możnaby się spodziewać gdyby w obu metodach użyto innych potencjałów wymiennie-korelacyjnych, ale wtedy porównanie nie miałoby sensu. Czyli jeśli chodzi o walidację wyników osiągnięto sukces połowiczny bo dwa z czterech związków (na 153 rozważane) dają porównywalne wyniki.

Struktury pasmowe przedstawione na rysunku B.1 są podobne, ale zgodność zdecydowanie nie jest dobra. Wszystko podsumowano zdaniem: „Therefore, one may assume that the differences between VASP- and Wien2k-derived B are due to the software used (perturbation theory and energy approach, respectively) rather than to the equilibrium lattice parameter applied.” Niezbyt rozumiem o co chodzi w tym zdaniu i prosiłbym w trakcie obrony o jego wyjaśnienie.

W dodatku C znajduje się rysunek C.1 gdzie napisano że punkty dopasowywano funkcjami parabolicznymi aby obliczyć masę efektywną. Problem w tym że nie wiadomo co jest na osi X na tym rysunku a parabola zdaniem recenzenta powinna być symetryczna względem osi Y, a funkcje na rysunku C.1 takie nie są. Sama ścieżka w przestrzeni odwrotnej też nie ma równoodległych punktów, nie wyjaśniono również dlaczego wybrano akurat taką ścieżkę.

Konkludując, praca składa się z seryjnych obliczeń struktury elektronowej związków Heuslera metodą PW (kodem VASP) do których można mieć pewne zastrzeżenia oraz późniejszego zastosowania modelu uczenia maszynowego SVR (metoda wektorów nośnych zaimplementowana w pakiecie scikit-learn) do dopasowania tych wyników modelem regresyjnym.

Ten drugi aspekt jest moim zdaniem dość oryginalny i stanowi główną wartość tej konkretnej pracy doktorskiej. Pojawia się coraz więcej prac stosujących różne modele AI do wyników pochodzących z obliczeń struktury elektronowej, jednak modele regresyjne mają moim zdaniem tutaj taką przewagę, że poza dopasowaniem jakiejś bardzo złożonej i niemożliwej do interpretacji funkcji pozwalającej aproksymować dane, możemy tutaj starać się zrozumieć jakieś mechanizmy, które stoją za dopasowaniem i struktury w zbiorze danych. Co prawda dopasowanie 33 wymiarowej przestrzeni parametrów do zbioru danych liczącego zaledwie kilkadziesiąt zestawów danych może się wydawać dyskusyjne, jednak jest to pewna zaleta metody SVR (która jest wariantem lepiej znanej metody SVM), i uważam że ten model został dobrze dobrany do problemu który tutaj był rozważany. Szkoda, że danych i skryptów w Pythonie związanych z artykułami wykorzystującymi metodę SVR autorka nie umieściła w otwartym dostępie (np. w ramach czasopisma jak to jest np. w Computer Physics Communications) lub też po prostu na jakimś serwisie w rodzaju githuba. Pozwoliłoby to dokładniej przyjrzeć się wybranym danym, a także wyciągnąć pewne dodatkowe wnioski, które być może nie są opisane w artykułach. Ponadto byłoby wiadomo dokładnie jakie dane zostały użyte do treningu oraz jakie były konkretne wartości predyktorów. O ile masa atomowa nie jest szczególnie kontrowersyjna, to już promień atomowy czy elektroujemność nie są oczywiste. Jaka jest elektroujemność metalu (który często może mieć kilka różnych wartościowości jako pierwiastek) w międzymetalicznym związku Heuslera? Zwykle transfery ładunku są małe, a często wcale nie oczywiste. Temperatura Debye'a wiąże się ściśle z modułem sztywności w związkach o strukturze regularnej, podobnie przewodność cieplna ma spory związek z tymi parametrami jeśli pominiemy przyczynę elektronowy. Z resztą dla jakiej temperatury i czystości materiału oraz jego zdefektowania była wprowadzona przewodność cieplna? Część tych parametrów wśród predyktorów jest liniowo zależna co utrudnia każdą procedurę dopasowania. Na przykład znając masy atomowe i objętość molową jaki sens jest podawać gęstość dla materiałów o tej samej strukturze krystalicznej?

Za ciekawy rezultat badań autorki uważam fakt, że model oparty o SVR może w ogóle w jakimś stopniu (zbliżonym do połowy) przewidywać wielkości takie jak przerwa energetyczna. Jeśli chodzi o parametr sieciowy czy moduł sztywności to nie jest szczególnie dziwne, ma tu bowiem prawdopodobnie miejsce pewne uogólnienie znanego dla metali ziem rzadkich prawa Vegarda. Poza tym jak już wspominałem, jako predyktory autorka podaje parametry od których te wielkości po prostu liniowo zależą.

Praca jest napisana w sposób w miarę staranny nie ma w niej zbyt wiele literówek, jej układ też jest czytelny.

Mimo różnych wątpliwości i niedociągnięć wspomnianych powyżej, uważam że praca jest

oryginalna oraz ciekawa, i spełnia przez to wymagania stawiane pracom doktorskim. Analiza danych wymagała niewątpliwie sporo pracy, a użyte metody i modele zastosowane w pracy są dość unikatowe. Sam pomysł na badania oceniam dość wysoko, nieco gorzej jego realizację, pewnie jednak miały tu swój wpływ ograniczenia czasowe. Sama praca miałaby dla szerszej społeczności większą wartość, gdyby dane na których powstała były w otwartym dostępne. Chodzi mi o część związaną z modelem regresyjnym, tzn. dane wejściowe do tego modelu i skrypty oraz parametry których użyto.

Według bazy Scopus, na koniec czerwca 2024, doktorantka jest współautorem 8 artykułów w latach 2018–2021 z których 5 opublikowanych w ciągu ostatnich dwóch lat stanowi bazę jej pracy doktorskiej. We wszystkich tych pięciu pracach autorka jest pierwszym autorem co świadczy o samodzielności i dogłębnym zrozumieniu tematu a także zaangażowaniu. Prace ukazały się w czasopiśmie wydawnictwa Elsevier: Solid State Communications (IF=2.1, 70 punktów), European Physical Journal B (IF=1.6, 40 punktów) oraz czasopiśmie wydawnictwa MDPI: Crystals (IF=2.4, 70 punktów, 2 prace), Inorganics (IF=3.1, 20 punktów). Ogólnie recenzent nie jest miłośnikiem lansowanej w ostatnich latach w polskiej nauce zasady dziedziczenia prestiżu i oceniania książek po okładce, ale wydawnictwo MDPI jest przez wielu oceniane jako kontrowersyjne. Z drugiej strony prawdopodobnie doktorantka zaczęła doktorat jeszcze w starym trybie i kończy jej się czas na jego obronę, co usprawiedliwia pośpiech, a mimo wszystko artykuły w czasopiśmie z grupy MDPI ukazują się bardzo szybko.

Poza cyklem prac związanych z doktoratem, autorka ma również 3 inne artykuły, w Intermetallics (IF=4.3, 100 punktów), Acta Physica Polonica A (IF=0.5, 70 punktów) oraz Journal of Alloys and Compounds (IF=5.8, 100 punktów).

Autorka prezentowała swoje osiągnięcia w formie posteru na dwóch konferencjach w Szczyrku w ramach 49 i 51 konferencji „International School and Conference on the Physics of Semiconductors” oraz w ramach organizowanej przez sieć Łukasiewicz we Wrocławiu konferencji „Advanced Technologies and Materials (ATAM) and Materials Science Conference on Advanced Functional Materials (MASCA)”.

W podsumowaniu, stwierdzam że przedstawiona mi do recenzji praca doktorska Pani mgr Kai Bilińskiej pt. „Study of Thermoelectric Properties of Half-Heusler Phases: ab initio and Machine Learning Analysis” spełnia wszystkie zwyczajowe i ustawowe wymagania stawiane pracom doktorskim i wnioskuję do Rady Naukowej Instytutu Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego Polskiej Akademii Nauk we Wrocławiu o dopuszczenie Pani mgr Kai Bilińskiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

dr hab. prof. UŚ Jerzy Goraus

.....
Instytut Fizyki
Augusta Chełkowskiego
Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych
Uniwersytet Śląski