



UMCS
INSTYTUT FIZYKI

UNIwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie
Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki

Instytut Fizyki

pl. Marii Curie-Skłodowskiej 1, 20-031 Lublin; tel. (081) 537 61 43; fax (081) 537 61 91
e-mail: fizyka@umcs.lublin.pl; www.fizyka.umcs.lublin.pl

Prof. dr hab. Ryszard Zdyb
Katedra Fizyki Powierzchni i Nanostruktur
Instytut Fizyki UMCS
e-mail: ryszard.zdyb@umcs.pl

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Mirali Jafari zatytułowanej
Electronic, magnetic and transport properties of selected van der Waals heterostructures

Wyizolowanie w 2004 roku grafenu otworzyło nowy rozdział w syntezie, badaniach i aplikacjach dwuwymiarowych materiałów. Pojedyncza warstwa atomów węgla okazała się być wyjątkowa pod wieloma względami: od istnienia bezmasowych fermionów Diraca, bardzo dużej prędkości i ruchliwości nośników ładunku, poprzez skwantowaną absorpcję światła, aż do zaskakująco dużej wytrzymałości mechanicznej. Te i wiele innych niezwykłych właściwości grafenu spowodowały gwałtowny rozwój badań podstawowych i stosowanych dotyczących tego materiału. Jednocześnie pewne niedostatki grafenu, np. bardzo mała wartość przerwy energetycznej, stały się motorem napędowym poszukiwań nowych dwuwymiarowych materiałów, które posiadałyby inne, niewystępujące w grafenie właściwości fizyczne.

Rozprawa doktorska mgr. Mirali Jafari wpisuje się w ten obszar i jest poświęcona teoretycznym badaniom dwuwymiarowych materiałów i złożonych z nich heterostruktur. Doktorant stosując obliczenia modelowe i z pierwszych zasad określa parametry struktury krystalograficznej, właściwości elektronowe, magnetyczne i transportowe wybranych dwuwymiarowych układów: silicenu, dichalkogenków wanadu oraz heterostruktur grafen/CrI₃. Bada również wpływ naprężeń występujących w rozważanych warstwach na ich właściwości.

Praca doktorska została wykonana w Instytucie Spintroniki i Informacji Kwantowej Wydziału Fizyki i Astronomii Uniwersytetu Adama Mickiewicza w Poznaniu. Promotorem rozprawy jest dr hab. Anna Dyrdał, a promotorem pomocniczym dr Martin Gmitra. Rozprawę tworzy cykl pięciu artykułów naukowych, czterech opublikowanych w regularnych czasopismach i jednego, będącego w trakcie recenzji i opublikowanego w bazie arXiv. Cykl poprzedzony jest szerokim wprowadzeniem do przedstawionych prac.

Artykuły składające się na rozprawę zostały opublikowane w Journal of Magnetism and Magnetic Materials (3) i Scientific Reports (1). We wszystkich publikacjach mgr Mirali Jafari jest pierwszym autorem, w jednym autorem korespondencyjnym. Warto podkreślić, że pomimo krótkiego czasu od ich opublikowania prace zostały odnotowane w środowisku naukowym i są cytowane (wszystkie cytowania/bez autocytowań): 6/5 (JMMM 2022), 15/13 (Sci. Rep. 2023), 3/3 (JMMM 2024), 7/4 (JMMM 2022).

Struktura rozprawy

Napisana w języku angielskim rozprawa składa się z siedmiu rozdziałów, podsumowania, spisu publikacji, trzech dodatków i informacji przedstawiającej dotychczasowe osiągnięcia Doktoranta. Całość liczy 200 stron.

Pierwsze trzy rozdziały wprowadzają czytelnika w tematykę badań i metody obliczeniowe stosowane przez Autora. Kolejne cztery rozdziały zawierają artykuły. Poza publikacjami znajdują się w nich również krótkie wprowadzenia do poruszanej problematyki, opisy metod badawczych oraz spis najważniejszych wyników i wniosków. Po syntetycznym podsumowaniu rozprawy znajduje się wyjątkowo obszerny, zawierający 441 pozycji, spis literatury. W pierwszym dodatku Autor w skrótowny sposób opisuje programy, które wykorzystał w obliczeniach, wymieniając również problemy badawcze, które z ich pomocą rozwiązał. Są to: Quantum Espresso, Quantum ATK, Wannier 90 code package, Wannier Tools, Vampire6, TB2J code package oraz Custom Python Tools.

Dodatek B zawiera oświadczenia współautorów o ich wkładzie w powstanie publikacji. Z przedstawionych oświadczeń w sposób jasny wynika bardzo duży albo dominujący wkład mgr. Mirali Jafari w każdym z zaprezentowanych w rozprawie artykułów.

Trzeci dodatek zawiera szczegółowe informacje dotyczące praw autorskich do rysunków zaczerpniętych z literatury i przedstawionych w rozprawie. Należy podkreślić, że kwestie dotyczące cytowań oraz wszelkich pozwoleń na prezentację wyników, rysunków i artykułów są przez Doktoranta potraktowane i wypełnione z niezwykłą starannością.

W kończącej rozprawę części poświęconej Doktorantowi znajdujemy między innymi informacje o współautorstwie w siedmiu opublikowanych artykułach i trzech znajdujących się w recenzji. Mgr Mirali Jafari wygłosił dziesięć referatów na konferencjach i seminariach, w tym jeden wykład zaproszony. W swoim stosunkowo dużym dorobku konferencyjnym posiada również trzynaście wystąpień plakatowych. Na podkreślenie zasługuje kierowanie grantem Preludium oraz dwa staże zagraniczne. Doktorant był również recenzentem kilku artykułów naukowych między innymi z Journal of Physics: Condensed Matter, co nie jest typowe na tym etapie kariery naukowej. Biorąc pod uwagę zaledwie czteroletni okres w karierze naukowej z przedstawionych informacji wynika ponadprzeciętny dorobek naukowy Autora rozprawy.

Opis rozprawy

We wstępie do rozprawy mgr Mirali Jafari wprowadza czytelnika w świat materiałów dwuwymiarowych. Rozpoczyna od grafenu i jego właściwości fizycznych, wspomina o pojedynczych warstwach zbudowanych z jednego pierwiastka, wprowadza dichalkogenki metali przejściowych (TMDC) oraz inne charakterystyczne grupy materiałów 2D.



Nieznacznie szerzej opisuje materiały TMDC podkreślając możliwość ich funkcjonalizacji poprzez dobór liczby warstw. Zwraca również uwagę na występowanie silnego oddziaływania spin-orbita w tych materiałach i wynikających stąd możliwości aplikacji w spintronice i elektronice dolinowej (*valleytronics*).

W tej samej części Doktorant definiuje cel pracy doktorskiej. Jest nim określenie właściwości elektronowych, magnetycznych i transportowych wybranych struktur van der Waalsa za pomocą obliczeń z pierwszych zasad i modelowej analizy. W szczególności Autor stara się odpowiedzieć na pytanie w jaki sposób sterować samoistnym lub indukowanym poprzez efekt bliskości magnetyzmem w dwuwymiarowych układach takich jak silicen, grafen, dichalkogenki metali przejściowych i wzajemnie obróconych warstwach 2D bazujących na grafenie.

Rozdział drugi poświęcony jest szerszemu opisowi dwuwymiarowych materiałów, które są związane z prowadzonymi przez Autora badaniami. Doktorant prezentuje dotychczasowy stan wiedzy dotyczący grafenu, heksagonalnego azotku boru i silicenu. Omawia również magnetyczne dichalkogenki metali przejściowych, w szczególności bazujące na wanadzie i chromie. W tej części przedstawia również podstawowe informacje dotyczące teoretycznego opisu magnetycznych materiałów 2D. W kolejnych dwu podrozdziałach wprowadza koncepcję heterostruktur van der Waalsa, czyli wielowarstwowych układów wykonanych z różnych materiałów 2D. Wyróżnia szczególną odmianę heterostruktur, w której pojedyncze warstwy są obrócone względem siebie wokół osi prostopadłej do ich powierzchni. W tym kontekście pojawia się termin *twistronics*, oznaczający zależność właściwości elektronowych od kąta skręcenia między warstwami. Doktorant w skróty opisuje sposoby *top-down* i *bottom-up* stosowane w procesie wytwarzania heterostruktur van der Waalsa. Opisuje potencjał tego typu heterostruktur w obserwacji nowych zjawisk oraz w modelowych urządzeniach spintronicznych.

Kolejny, poza wynikami najobszerniejszy rozdział dotyczy opisu teoretycznych metod badawczych stosowanych przez Doktoranta. Mgr Mirali Jafari rozpoczyna tę część od skrótego przedstawienia rozwoju metod obliczeniowych stosowanych do modelowania materiałów koncentrując się na metodzie DFT. W następnych podrozdziałach Autor wprowadza równanie Schrodingera dla wielociałowego układu oraz kolejne przybliżenia m.in. przybliżenie średniego pola i Hartree-Focka.

W części dotyczącej opisu teorii funkcjonału gęstości Autor wprowadza podstawowe założenia i równania teorii Hohenberga-Kohna i Kohna-Shama. W krótki sposób prezentuje przybliżenia potencjału korelacyjno-wymennego LDA i GGA oraz przedstawia samouzgodnioną procedurę obliczeń prowadzącą do określenia właściwości fizycznych układu w stanie podstawowym. W podsumowaniu metody DFT wymienia również jej niedostatki: brak znajomości dokładnego potencjału korelacyjno-wymennego, niedoszacowanie wartości przerwy energetycznej, problem układów, w których występują wiązania van der Waalsa oraz problem skalowalności obliczeń. Autor prezentuje również najczęściej stosowane przybliżenia do określenia funkcji własnych orbitali atomowych i pseudopotencjałów wykorzystywanych w obliczeniach.

W następnej części Doktorant prezentuje stosowane w obliczeniach korekty uwzględniające wyżej wymienione niedostatki DFT, czyli istnienie wiązań van der Waalsa w postaci poprawek D2 i D3,



korekty szerokości przerwy energetycznej w postaci poprawki średniego pola Hubbarda i wprowadzenie dodatkowego członu do potencjału korelacyjno-wymennego. Zwraca również uwagę na konieczność uwzględnienia oddziaływania spin-orbita w przypadku obliczeń obejmujących atomy pierwiastków o dużej liczbie atomowej.

W kolejnej części mgr Mirali Jafari wprowadza model opisujący grafen, który konstruuje na bazie metody ciasnego wiązania uwzględniającej najbliższych sąsiadów. Wprowadza między innymi zaburzenie symetrii inwersji poprzez dołączenie podłoża i indukowaną w ten sposób przerwę energetyczną, zależne od podsioci oddziaływanie spin-orbita i efekt bliskości z podłożem oraz efekt Rashby. W końcowej części przedstawia pełen hamiltonian opisujący układy zwierające warstwę grafenu.

Doktorant opisuje również zjawiska transportu w nanostrukturach. Poczynając od zdefiniowania charakterystycznych z punktu widzenia zjawisk transportu odległości przedstawia dwa główne reżimy: transport balistyczny i dyfuzyjny. Następnie opisuje dwa modele przewodzenia prądu przez nanoskopowe układy: model Landauera i metodę nierównowagowych funkcji Greena.

Kolejne rozdziały (4-7) zawierają cztery opublikowane artykuły (trzy w Journal of Magnetism and Magnetic Materials, jeden w Scientific Reports) oraz jeden artykuł opublikowany w bazie preprintów (arXiv). Każdy artykuł opatrzony jest krótkim komentarzem Doktoranta.

Rozdział 4 zawiera artykuł autorstwa M.A. Jafari, A.A. Kordbacheh, A. Dyrdał zatytułowany *Electronic and magnetic properties of silicene monolayer under bi-axial mechanical strain: First principles study* został opublikowany w Journal of Magnetism and Magnetic Materials (554 (2022) 169260).

W pracy przedstawione są wyniki teoretycznych badań wpływu zewnętrznych naprężeń i domieszkowania warstwy silicenu atomami Cr na jej właściwości strukturalne, elektronowe i magnetyczne. Autor prezentuje wyniki dla dwuosiowych naprężeń indukowanych wzdłuż wektorów bazowych komórki prostej silicenu w zakresie od -6 do +8%. Poza przypadkiem niedomieszkowanego silicenu Doktorant rozważa silicen domieszkowany pojedynczym atomem Cr w konfiguracji podstawieniowej oraz dwa przypadki dimerów Cr: jeden w konfiguracji podstawieniowej obu atomów, drugi – podstawienie jednego atomu Si dwoma atomami Cr.

Uzyskane wyniki pokazują, że dołączenie atomów Cr do sieci silicenu w istotny sposób modyfikuje parametry krystalograficzne, w szczególności odległość między podsięciami silicenu (*buckling*). W przypadku dimeru Cr oznaczonego w pracy jako VDimer, przy naprężeniu -4% dochodzi do bardzo dużego zwiększenia odległości obu podsioci do około 0,8 Å. W przypadku pojedynczego atomu Cr przy tym samym naprężeniu *buckling* wynosi zaledwie 0,1 Å. Są to istotne wyniki, ponieważ odległość między podsięciami jest kluczowa z punktu widzenia potencjalnego sterowania wartością przerwy energetycznej. Wyniki obliczeń struktury elektronowej potwierdzają istotny wpływ domieszkowania w konfiguracji VDimer, dla której pojawia się przerwa energetyczna 0,13 eV bez naprężeń, 0,12 eV w przypadku naprężenia -2% i 0,05 eV dla +4%. Ostatni przypadek jest dyskusyjny biorąc pod uwagę rysunek B.6, który sugeruje metaliczny charakter warstwy.



Autor wyznacza również wartości momentów magnetycznych w rozważanych układach. Z przeprowadzonych badań wynika, że we wszystkich przypadkach mamy do czynienia ze skończonymi wartościami momentów magnetycznych, co sugeruje istnienie uporządkowania magnetycznego. W przypadku konfiguracji HDimer wartości te lokują się w zakresie od około 7,5 do około 8 magnetonów Bohra w szerokim zakresie naprężeń od -2 do +4%.

Temat magnetyzmu nie jest szerzej dyskutowany w omawianej publikacji. Pojawia się pytanie czy otrzymane wartości momentów magnetycznych są wartościami przypadającymi na atom Cr, czy na każdy z atomów układu (również atomów Si)? Autor w tekście pisze o „*spin polarization of silicene monolayer doped with Cr atoms*”, co mogłoby sugerować, że mowa jest o średnim momencie magnetycznym przypadającym na każdy atom. Inne pytania dotyczą ewentualnego charakteru uporządkowania: czy jest on ferro-, czy antyferromagnetyczny lub inny i kierunku osi łatwej?

Rozdział 5 dotyczy właściwości elektronowych i magnetycznych dichalkogenków metali przejściowych VX_2 , gdzie X oznacza S, Se lub Te. W skład tego rozdziału wchodzi dwie publikacje. Pierwsza, autorstwa Mirali Jafari, Wojciech Rudziński, Józef Barnaś i Anna Dyrdał zatytułowana *Electronic and magnetic properties of 2D vanadium-based transition metal dichalcogenides* została opublikowana w Scientific Reports (13 (2023) 20947).

Punktem wyjścia jest optymalizacja struktury krystalograficznej pojedynczych i podwójnych warstw badanych dichalkogenków. Doktorant określa stałe sieci zauważając, że zwiększają swoją wartość wraz ze wzrostem liczby Z atomu chalogenu w związku. Strukturę pasmową wzdłuż kierunków wysokiej symetrii Autor wyznacza korzystając z dwu przybliżeń: GGA+U i GGA-SOC. W wyniku otrzymuje charakter półprzewodnikowy, metaliczny lub półmetaliczny badanych warstw. Wszystkie pojedyncze warstwy wykazują uporządkowanie ferromagnetyczne. Układy dwuwarstwowe wykazują porządek albo ferromagnetyczny (VS_2) albo antyferromagnetyczny (VSe_2 i VTe_2). Wyznaczone wartości momentów magnetycznych atomów wanadu rosną wraz z liczbą atomową Z atomów chalogenu (i stałą sieciową dichalkogenku). Na podstawie obliczonej energii anizotropii magnetycznej Doktorant stwierdza, że oś łatwa magnetyzacji leży w płaszczyźnie warstwy dla wszystkich trzech rozważanych związków. Dodatkowo korzystając z przybliżenia pola średniego i niezależnie z symulacji Monte Carlo Autor wyznacza temperatury Curie dichalkogenków. Zwraca jednocześnie uwagę, że T_C obliczone w modelu pola średniego stanowi górną granicę temperatury przejścia fazowego ferromagnetyk-paramagnetyk. Wyznaczone temperatury Curie przekraczają lub są w pobliżu temperatury pokojowej w przybliżeniu pola średniego i albo w pobliżu (VS_2) albo poniżej (VSe_2 i VTe_2) temperatury pokojowej w przypadku symulacji Monte Carlo. Doktorant wyliczył również krzywe histerezy dla badanych związków wskazując na znaczące różnice w polach koercji. Artykuł zawiera także wyniki obliczeń analitycznych i DFT widm dyspersji magnonów wzdłuż kierunków wysokiej symetrii badanych dichalkogenków. Autor wykazuje, że obie metody dają zgodne rezultaty.

Druga publikacja wchodząca w skład tego rozdziału, zatytułowana *Effect of strain on the electronic and magnetic properties of bilayer T-phase VS_2 : A first-principles study*, jest autorstwa



Mirali Jafari i Anny Dyrdał. Została opublikowana w czasopiśmie Journal of Magnetism and Magnetic Materials (589 (2024) 171618).

Zgodnie z tytułem publikacji głównym tematem badań jest wpływ naprężeń na właściwości elektronowe i magnetyczne dwu warstw disiarczku wanadu. Jako punkt wyjściowy Doktorant przeprowadza szczegółowe badania struktury krystalograficznej układu pod wpływem przykładanych naprężeń w zakresie od -10 do +10%. Do określenia magnetycznego stanu podstawowego uwzględnia oddziaływania kulombowskie. Mają one istotny wpływ na anty- lub ferromagnetyczne uporządkowanie dwuwarstwy. Bez tych oddziaływań układ jest antyferromagnetykiem, a wraz ze zwiększaniem wpływu oddziaływań kulombowskich - przechodzi do stanu ferromagnetycznego. Analiza długości wiązań, stałych sieciowych i stabilności układu pozwoliła wywnioskować o istotnym wkładzie oddziaływań kulombowskich ($U = 2$ eV) i tym samym ferromagnetycznym sprzężeniu warstw. Znajomość podstawowego stanu magnetycznego umożliwiła badania zależnej od spinu struktury elektronowej. Wynika z niej, że prawie we wszystkich przypadkach układ jest metaliczny. Wyjątkiem jest pojawienie się niewielkiej przerwy energetycznej przy naprężeniach równych +4 i +8% dla przypadku obliczeń w przybliżeniu GGA z uwzględnionym oddziaływaniem spin-orbita. Uzyskane wyniki wskazują na wzrost momentów magnetycznych wanadu przy rozciąganiu struktury, w zależności od przybliżenia do $1,91 \mu_B$ (GGA+U) lub $1,45 \mu_B$ (GGA+SOC) przy naprężeniu +10%. Ściskanie warstwy powoduje zmniejszanie wartości momentów magnetycznych do około $0,34 \mu_B$ (GGA+U) i niemal zero ($0,001 \mu_B$) (GGA+SOC) przy naprężeniu -10%. Interesującym wynikiem jest pojawienie się stosunkowo dużej magnetycznej anizotropii przy rozciąganiu układu (między 0,20 a 0,23 meV w zakresie naprężeń od +2 do +8%) i jej zanikaniu dla naprężeń ściskających.

Doktorant wyznacza stałe sprzężenia wymiany i między innymi na ich podstawie określa temperaturę Curie układu. Okazuje się, że dla naprężeń rozciągających powyżej +4% temperatura Curie jest wyższa lub porównywalna z pokojową niezależnie od metody i przybliżeń użytych w obliczeniach. W przypadku naprężeń ściskających temperatura Curie jest poniżej 100 K lub równa 0.

W kolejnym, szóstym rozdziale przedstawiony jest artykuł autorstwa M.A. Jafari, M. Wawrzyniak-Adamczewska, S. Stagraczyński, A. Dyrdał, J. Barnaś, zatytułowany *Spin valve effect in two-dimensional VSe₂ system*, opublikowany w Journal of Magnetism and Magnetic Materials (548 (2022) 168921).

W tej publikacji Doktorant wykorzystuje w badaniach naturalne antyferromagnetyczne uporządkowanie kryształu VSe₂ do badania zjawiska magnetooporu w dwuwarstwowym układzie. Autor prowadzi badania zaworów spinowych zbudowanych zarówno z fazy 1T (oktaedralnej) jak i 2H (trygonalnej). Uzyskane wyniki wskazują na fakt, że w układach dwuwarstwowym, niezależnie od fazy, dominuje antyferromagnetyczne sprzężenie pomiędzy ferromagnetycznie uporządkowanymi warstwami wanadu. Przeprowadzone badania struktury pasmowej zaworu spinowego wykonanego z fazy 1T dichalkogenu selenu wskazują na metaliczny charakter dwuwarstwy niezależnie od tego czy jest w fazie ferro- czy antyferromagnetycznej. Podobnie jest w przypadku ferromagnetycznej fazy 2H. Natomiast dla antyferromagnetycznego uporządkowania



dwuwarstwy w fazie 2H wokół poziomu Fermiego otwiera się niewielka, o wartości około 0,5 eV, skośna przerwa energetyczna.

Wyniki badań magnetooporu wskazują na stosunkowo małe wartości, rzędu 10 i 60%, odpowiednio dla fazy 1T i 2H. Doktorant przeprowadził również badania cieplnego magnetooporu. Wykorzystując obliczone przewodnictwo cieplne dwuwarstwy przy uporządkowaniu ferro- i antyferromagnetycznym wyznaczył wartości cieplnego magnetooporu i współczynniki wydajności termoelektrycznej. Są one bardzo małe w przypadku dwuwarstwy wykonanej z fazy 1T i około trzy rzędy wielkości większe dla fazy 2H.

Przeprowadzone badania pokazują znaczące różnice we właściwościach fizycznych między fazami 1T i 2H dwuwarstw dichalkogenu selenu i tym samym są wyraźną wskazówką dla eksperymentatorów, którą fazę należy wytworzyć w celu uzyskania najlepszych spintronicznych właściwości układu.

Rozdział siódmy zawiera manuskrypt zatytułowany *Exchange and spin-orbit proximity driven topological and transport phenomena in twisted graphene/CrI₃ heterostructures* autorstwa M. Jafari, M. Gmitra, A. Dyrdał opublikowany w bazie arXiv.

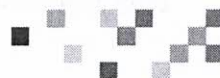
W tej publikacji Doktorant zajmuje się heterostrukturą złożoną z grafenu i ferromagnetycznej warstwy CrI₃ i bada wpływ wzajemnych relacji oddziaływania wymiany i spin-orbita, naprężeń oraz kąta skręcenia między warstwami na właściwości elektronowe i magnetyczne heterostruktury. W przypadku braku wzajemnego skręcenia warstw następuje silna hybrydyzacja pomiędzy stanami elektronowymi grafenu i warstwy magnetycznej. Wzajemne obrócenie warstw istotnie modyfikuje strukturę elektronową układu przesuwając punkty Diraca grafenu do przerwy energetycznej CrI₃. Wśród najistotniejszych wyników publikacji jest wykazanie, że efekt bliskości powoduje zależne od doliny rozszczepienie spinowe liniowych pasm grafenu i występowanie w heterostrukturze kwantowego anomalnego efektu Halla.

Jednym z pojawiających się pytań jest w jaki sposób Autor znalazł kąt skręcenia równy 10,89°, jako ten szczególny, przy którym pojawiają się opisane w manuskrypcie efekty? Czy były sprawdzane inne kąty?

Ocena rozprawy

Układ rozprawy jest prawidłowy, tworzy logiczną całość. Część wstępna wprowadza czytelnika kolejno w tematykę badawczą i zastosowane metody służące osiągnięciu jasno zdefiniowanych celów rozprawy. Następująca po tym prezentacja wyników w postaci artykułów jest dodatkowo opatrzona precyzyjnymi komentarzami. Rozprawa została napisana w sposób bardzo czytelny, prostym językiem i zawiera odpowiednio dobrane rysunki. Dysertacja poza drobnymi potknięciami nie zawiera znaczących pomyłek.

Pozytywną uwagę zwraca systematyczne omówienie kolejnych elementów i przybliżeń stosowanych w obliczeniach. Biorąc pod uwagę bogaty zbiór literatury rozprawa z powodzeniem może być przewodnikiem do nauki podstaw techniki DFT i jej zastosowań w obliczeniach podstawowych parametrów fizycznych niskowymiarowych struktur.



Komentarze i pytania:

1. Komentarz do tytułu: pierwszy artykuł dotyczy silicenu, który należy do grupy nievanderaalsowskich materiałów.
2. Czy w przypadku dwóch warstw ich wzajemne ułożenie w płaszczyźnie warstwy było również optymalizowane (odległość między warstwami i położenia atomów jednej warstwy względem położenia atomów drugiej)?
3. Biorąc pod uwagę fakt istnienia porządku magnetycznego (FM lub AFM) w badanych warstwach, czy Doktorant obliczał wartości momentów magnetycznych atomów S, Se i Te i ich kierunek (zwrot) w stosunku do kierunku (zwrotu) momentów magnetycznych atomów wanadu?
4. Czy Autor sprawdzał możliwości lokowania pojedynczego atomu i dimerów Cr w innych konfiguracjach, np. atom Cr w środku heksagonu?

Uwagi techniczne:

1. Częste, niepotrzebne używanie wielkich liter: the Time-independent, the Hydrogen atom (str. 41), the Kinetic energies, Hartree Energy, Reduced Planck's constant (str. 42), Hartree Potential (tuż obok Hartree potential) (str. 47), on the Molecular structures (str. 56), from the Magnons (str. 56), Heisenberg Hamiltonian (str. 56), Pseudopotentials (str. 60, 64), the First principle (str. 60, 63).
2. Brak jednolitego systemu w używaniu wielkich liter. Przykłady: mean-field approximation, Mean-Field Approximation, Mean-field Approximation, Mean-field approximation, Mean-Field approximation.
Inne przykłady: Plane-Wave, Plane-wave, plane-wave (str. 58);
Density functional theory (str. 62), Density Functional Theory (str. 63, 64)
3. Brak jednolitego zapisu wyrażeń z łącznikiem lub bez np.: first-principle, first principle.
4. W spisie literatury występują małe litery w nazwach czasopism. Tytuły są zapisane normalną kursywą lub italikiem.

Podsumowując rozprawę należy stwierdzić, że mgr Mirali Jafari przeprowadził systematyczne badania wybranych dwuwymiarowych struktur określając ich właściwości krystalograficzne, elektronowe, magnetyczne i transportowe. Wyniki zostały opublikowane w międzynarodowych periodykach, a według deklaracji Autora rozprawy oraz pozostałych współautorów artykułów główny wkład do powstania publikacji miał Doktorant. Przedstawiona do oceny rozprawa oraz opublikowane artykuły świadczą o zdobytej przez Doktoranta wiedzy dotyczącej dwuwymiarowych materiałów oraz metod obliczeniowych umożliwiających określenie ich podstawowych właściwości fizycznych.

Należy podkreślić, że przedstawione publikacje dostarczają wielu ilościowych informacji o właściwościach fizycznych badanych układów, ich zmian pod wpływem temperatury, przykładanych naprężeń, zewnętrznych pól magnetycznych. O naukowej wadze uzyskanych wyników świadczy stosunkowo duża liczba cytowań opublikowanych artykułów. W mojej ocenie zaprezentowane wyniki są bardzo dobrą wskazówką dla eksperymentatorów, ułatwiając



poszukiwanie odpowiednich konfiguracji materiałów w celu realizacji teoretycznych przewidywań.

Biorąc pod uwagę powyższe fakty wnoszę o wyróżnienie ocenianej rozprawy doktorskiej.

Końcowa ocena

Przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska stanowi jednolity opis podstawowych właściwości fizycznych wybranych dwuwymiarowych układów i ich heterostruktur. Tym samym stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego. Stwierdzam, że rozprawa doktorska mgr. Miarli Jafari spełnia wymagania określone w ustawie *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* (Dz.U. z 2020 r. poz. 85 z późn. zm.) i może być dopuszczona do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Dysiond ZayS



