

prof. dr hab. Karol Szałowski

Łódź, dn. 07.01.2026 r.

Katedra Fizyki Ciała Stałego

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Uniwersytet Łódzki

Recenzja rozprawy doktorskiej Pana mgr. Mirali Jafari
p.t. *Electronic, magnetic and transport properties*
of selected van der Waals heterostructures

Przedstawiona rozprawa doktorska powstała w Instytucie Spintroniki i Informacji Kwantowej na Wydziale Fizyki i Astronomii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Promotorem jest dr hab. Anna Dyrdał, prof. UAM; rolę promotora pomocniczego pełni dr Martin Gmitra z Instytutu Fizyki Uniwersytetu Pavla Jozefa Šafárika w Koszycach oraz Instytutu Fizyki Doświadczalnej Słowackiej Akademii Nauk w Koszycach. Rozprawa przyjmuje formę zbioru opublikowanych i powiązanych tematycznie artykułów naukowych, spełniając przez to wymagania określone w art. 187 ust. 3 ustawy z dn. 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce¹.

W skład przedłożonego zbioru wchodzi 5 publikacji współautorskich (powoływanych dalej jako [I]-[V]), opublikowanych w latach 2022–2025; w każdej z nich Doktorant jest pierwszym autorem, a wśród współautorów występuje promotor rozprawy (oraz w niektórych przypadkach 1–3 współautorów, zazwyczaj z ośrodka poznańskiego). Spośród tych prac 4 zostały opublikowane w czasopismach umieszczonych na liście Journal Citation Reports (uwzględnionych również w wykazie o którym mowa w art. 186 ust. 1 ustawy – por. komunikat Ministra Edukacji i Nauki z dnia 5 stycznia 2024 r. w sprawie wykazu czasopism naukowych i recenzowanych materiałów z konferencji międzynarodowych), a jedna ma formę preprintu umieszczonego na serwerze arXiv. Całość rozprawy napisana została języku angielskim; rozprawę zaopatrzono w wymagane przez art. 187 ust. 4 ustawy streszczenie w języku polskim i angielskim. Trzy spośród publikacji ukazały się w czasopiśmie *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* (o Impact Factorze równym 3,0 za 2024 r.) – jest to czasopismo o uznanej

¹ t.j. Dz. U. z 2024 r., poz. 1571, ze zm.

renomie w fizyce materiałów magnetycznych i znaczącej popularności. Jedna praca opublikowana została w wielodyscyplinowym czasopiśmie o otwartym dostępie *Scientific Reports* (IF równy 3,9 za 2024 r.), sytuującym się w 89 centylu wśród takich czasopism i często wybieranym do komunikowania wyników z obszaru nauk fizycznych. Dostrzegam również umieszczenie preprintów prac opublikowanych później w *Journal of Magnetism and Magnetic Material* na serwerze *arXiv*, co sprawia, że całość dorobku składającego się na rozprawę doktorską została udostępniona w ramach otwartego dostępu. Uważam wybór czasopism za odpowiedni z punktu widzenia badanej tematyki oraz dobrze służący upowszechnianiu uzyskanych wyników w społeczności fizyków fazy skondensowanej.

W przedłożonej rozprawie podstawowym celem jest obliczeniowe zbadanie struktury elektronowej, właściwości magnetycznych i transportowych dość szerokiej grupy układów dwuwymiarowych. Badane materiały nie ograniczają się, jak mógłby to wskazywać sam tytuł, do heterostruktur van der Waalsa, a obejmują np. monowarstwy silicenu, dichalkogenki metali przejściowych zawierające wanad (mono- i dwuwarstwowe, gdzie jednak obie warstwy są identyczne a więc nie jest to heterostruktura) oraz jedynie jedną typową heterostrukturę złożoną z CrI_3 oraz grafenu. Sam tytuł rozprawy może się zatem wydać nieco mylący.

Cykl publikacji poprzedzony został przez Doktoranta obszernym wstępem wyjaśniającym szczegółowo stosowane metody badawcze oraz cele rozprawy, prezentującym materiały stanowiące przedmiot zainteresowania i nakreślającym kontekst prowadzonych badań.

Pierwszy rozdział stanowi zręczne wprowadzenie do tematyki materiałów dwuwymiarowych, przybliżające odkrycie i właściwości grafenu oraz obszerną klasę materiałów dwuwymiarowych, której badania zainicjowała synteza grafenu. Rozdział zarysowuje także podstawowe cele pracy oraz przybliża jej strukturę – zawartość kolejnych rozdziałów – oraz sygnalizuje wykorzystane metody.

Rozdział drugi wprowadzenia poświęcony jest bardziej szczegółowemu omówieniu badanych materiałów dwuwymiarowych. Pierwsza jego część dotyczy grafenu, heksagonalnego azotku boru oraz silicenu. Dalej Autor przedstawia dichalkogenki metali przejściowych, w tym podgrupę wanadków wykazującą interesujące właściwości magnetyczne oraz trójhalkogenki chromu, a następnie wprowadza metodologię opisu teoretycznego właściwości magnetycznych w oparciu o efektywny hamiltonian. Trzecia część tego rozdziału dotyczy heterostruktur van der Waalsa i opartych na nich urządzeń spintroniki wykorzystujących efekty bliskości, zaś ostatni podrozdział przybliża pojęcia twistroniki. Wszystkie te części zawierają odniesienia do wyników eksperymentalnych i bogatego zakresu literatury.

Przedmiotem kolejnego rozdziału są metody obliczeniowe wykorzystywane w rozprawie, oparte przede wszystkim na teorii funkcjonału gęstości (DFT). Rozpoczyna go opis aspektów historycznych oraz cech charakterystycznych tego podejścia. Dalej zostaje

przedstawione równanie Schrödingera dla układu wielu cząstek i użyteczne dla jego formułowania przybliżenia, a także podejście Hartree, Hartree-Focka i równania Kohna-Shama. Wreszcie zarysowana zostaje teoria funkcjonału gęstości oraz sposoby obliczania energii korelacyjno-wymiennej, jak również schemat blokowy obliczeń oraz wyszczególnione zostają ograniczenia metod obliczeniowych opartych na DFT. Dalej omówione zostają dogodne bazy oraz pojęcie pseudopotencjału. Wreszcie Autor dyskutuje metody uwzględnienia długozasięgowych oddziaływań van der Waalsa, oddziaływania kulombowskiego oraz oddziaływania spin-orbita. Dalej mowa o efektywnych hamiltonianach użytecznych w opisie struktury pasmowej, opartych na przybliżeniu ciasnego wiązania i wprowadzających dozwolone przez symetrię układu człony, opisujące oddziaływanie typu spin-orbita. Osobna, końcowa część poświęcona jest transportowi elektronowemu i jego modelowaniu w oparciu o podejście Landauera oraz nierównowagowe funkcje Greena.

Łącznie opisane wprowadzenie metodologiczne liczy ponad 70 stron i należy je uznać za kompletne i starannie przygotowane, szczegółowo i wyczerpująco objaśniające niezbędne aspekty poszczególnych metod obliczeniowych stosowanych w publikacjach składających się na rozprawę.

Obliczenia DFT przedstawione w pracach [I-IV] tworzących rozprawę Autor przeprowadził przy użyciu pakietu Quantum ATK w ramach bazy fal płaskich. Pakiet Quantum ATK zgromadził w 2024 r. ponad 750 cytowań (<https://atomistic.software/>). Używane były również dodatkowe, wyspecjalizowane programy dedykowane wąskospecjalistycznym celom, jak np. Vampire do symulacji właściwości magnetycznych. W pracy [V] zastosowany został pakiet Quantum ESPRESSO, używający bazy fal płaskich; jest to narzędzie otwartoźródłowe o bardzo znacznej popularności [ponad 3000 cytowań w 2024 r. (<https://atomistic.software/>)]. Dobór narzędzi obliczeniowych należy ocenić jako właściwy.

Kolejne rozdziały zawierają przede wszystkim publikacje składające się na rozprawę. Każdy z nich jest zaopatrzony we wprowadzenie wyjaśniające cele badań, rekapitulujące główne rezultaty i nakreślające wnioski.

Czwarty rozdział rozprawy stanowi samodzielnie publikacja M. Jafari, A. Kordbacheh, A. Dyrdał, *Electronic and magnetic properties of silicene monolayer under bi-axial mechanical strain: First principles study*, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **554** (2022) 169260; DOI:10.1016/j.jmmm.2022.169260, dalej powoływana jako [I]. Istotą pracy jest zbadanie monowarstwy silicenu domieszkowanej chromem z punktu widzenia dalszego kontrolowania właściwości elektronowych naprężeniem dwuosiowym. Badania Autora obejmowały domieszki Cr typu podstawieniowego (pojedynczy atom oraz podstawienie 2 sąsiednich atomów Si przez Cr lub też podstawienie 1 atomu Si przez dimer Cr) rozważane w superkomórce rozmiaru 4x4. Pierwszy etap badań stanowiła analiza geometrii układu z domieszkowaniem (przede wszystkim długości wiązań) w funkcji naprężenia. Przeprowadzona dalej systematyczna analiza ewolucji

struktury elektronowej w zależności od naprężenia pozwoliła stwierdzić, że domieszkowanie określonego rodzaju (podstawienie 1 atomu Si 2 atomami Cr) może prowadzić do otwierania w silicenie przerwy energetycznej, jednak naprężenie konkuruje z tym mechanizmem i prowadzi do przywrócenia metaliczności układu. W konfiguracji podstawienia 2 atomów Si również pojawia się możliwość otwierania przerwy, ale dla silnego naprężenia ściskającego. Analizę struktury pasmowej wzbogacono o wykresy obrazujące udział atomów Si i Cr w tworzeniu stanów formujących pasma elektronowe oraz o wyniki porównawczych obliczeń bez uwzględniania oddziaływania spin-orbita. Przedmiotem zainteresowania był również moment magnetyczny, który wykazywał w szerokim zakresie naprężeń niezerowe wartości dla każdego z badanych scenariuszy domieszkowania, cechując się zauważalną zależnością od naprężenia.

Rozdział piąty poświęca Autor właściwościom elektronowym i magnetycznym dichalkogenków metali przejściowych opartych na wanadzie. Pierwszą część omawianego rozdziału stanowi praca M. Jafari, W. Rudziński, J. Barnaś, A. Dyrdał, *Electronic and magnetic properties of 2D vanadium-based transition metal dichalcogenides*, *Scientific Reports* **13** (2023) 20947; DOI:10.1038/s41598-023-48141-1, oznaczana dalej jako [II] (nb. na s. 91 podano błędnie tytuł czasopisma). Dotyczy ona przewidywania właściwości mono- i dwuwarstw VS_2 , VSe_2 i VTe_2 w strukturze H. Obliczenia przeprowadzono z uwzględnieniem poprawki kulombowskiej bądź też oddziaływania spin-orbita. Początkowy etap badań obejmował określenie parametrów geometrycznych (stałe sieci, długości wiązań) dla wszystkich badanych struktur. Następnie określono energie całkowite dla przypadku braku uporządkowania magnetycznego oraz dla fazy ferromagnetycznej i antyferromagnetycznej, a to w celu wybrania stanu podstawowego. Dla określonego stanu podstawowego wyliczono momenty magnetyczne. Dalej scharakteryzowano strukturę elektronową badanych układów. Przedmiotem szczególnego zainteresowania stała się energia anizotropii magnetycznej o kierunku prostopadłym. W omawianej publikacji Autor wyznaczył również wartości całek wymiany dla pierwszych i drugich sąsiadów w płaszczyźnie oraz międzypłaszczyznowe dla dwuwarstwy. Oszacowane całki wymiany (wraz z wyznaczonymi energiami anizotropii magnetokrystalicznej) pozwoliły na oszacowanie temperatury Curie bądź metodą pola molekularnego, bądź też metodą symulacji Monte Carlo (stwierdzono, że metoda pola molekularnego zawyża temperaturę krytyczną półtorakrotnie lub nawet ponad dwukrotnie w stosunku do wyniku symulacji Monte Carlo). Należy dostrzec, że układy dwuwymiarowe opisywane w pełni izotropowym modelem Heisenberga nie porządkują się magnetycznie, zatem kluczową rolę w wyznaczeniu temperatury krytycznej odgrywa tu energia anizotropii. Przedmiotem modelowania stała się także pętla histerezy. Oprócz tego Autor scharakteryzował relacje dyspersyjne magnonów (dokonując obliczeń w ramach liniowej teorii fal spinowych w oparciu o wyznaczone parametry hamiltonianu oraz używając bezpośrednio pakietu Quantum ATK). Tu chciałbym podkreślić użycie przez Autora hamiltonianu spinowego w wersji z klasycznymi spinami zlokalizowanymi, jako że dla wspomianej wartości spinu (przyjętej dla atomów wanadu jako $1/2$), wyrazy zawierające anizotropie w hamiltonianie (5) z kwantowymi operatorami spinu dawałyby stały wkład do energii.

Drugą część rozdziału piątego rozprawy stanowi publikacja M. Jafari, A. Dyrdał, *Effect of strain on the electronic and magnetic properties of bilayer T-phase VS₂: A first-principles study*, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **589** (2024) 171618; DOI: 10.1016/j.jmmm.2023.171618 (dalej [III]). W pracy [III] przedmiotem badań obliczeniowych była dwuwarstwa VS₂ o strukturze T, ze zwróceniem szczególnej uwagi na wpływ naprężenia dwuosiowego na właściwości elektronowe. Obliczenia prowadzono z zachowaniem metodologii analogicznej jak w pracy [II]. Zbadana została zależność odległości międzyatomowych od stałej sieci (z zauważalną niemonotonicznością w pewnych obszarach wielkości naprężenia). Przedmiot dalszego zainteresowania stanowiły właściwości magnetyczne; przeanalizowano stan podstawowy w funkcji wielkości parametru energii oddziaływań kulombowskich. Stwierdzono silną zależność momentu magnetycznego (zlokalizowanego na atomach V) od naprężenia (przy czym odpowiednio silne naprężenie ściskające redukuje do zera ów moment magnetyczny, co widać w wynikach obliczeń z uwzględnieniem oddziaływania spin-orbita); określono także energię anizotropii magnetycznej (stwierdzając, że jest ona znacząco zwiększana przez zastosowanie naprężeń rozciągających). Dalej określono całki wymiany dla najbliższych i drugich sąsiadów w płaszczyźnie oraz międzypłaszczyznowe dla modelu Heisenberga (zarówno z uwzględnieniem oddziaływań kulombowskich przez parametr U , jak i z uwzględnieniem oddziaływania spin-orbita – ze sporymi różnicami pomiędzy tymi podejściami). Pozwoliło to na oszacowanie temperatury krytycznej w oparciu o metodę pola molekularnego (MFA) oraz przybliżenie przypadkowych faz (RPA). Całka dla drugich sąsiadów wykazuje zachowanie oscylacyjne. Interesująca wydaje się zmiana znaku całki wymiany międzywarstwowej dla silnego naprężenia rozciągającego; to mogłoby wpłynąć na stan podstawowy. Obliczenia pozwoliły stwierdzić, że naprężenie typu rozciągającego przyczynia się do zwiększenia temperatury Curie. Załącznik zawiera wykresy struktury pasmowej dla pełnego zakresu badanych naprężeń.

Kolejny rozdział rozprawy poświęcony jest heterostrukturom van der Waalsa i ich zastosowaniu w obszarze tworzenia zaworów spinowych. Wprowadzenie do rozdziału przybliża istotę zaworu spinowego, istotność zjawiska gigantycznego magnetooporu oraz rolę materiałów dwuwymiarowych w konstrukcji takich urządzeń spintronicznych, co stanowi motywację kolejnej z prac Doktoranta. Resztę rozdziału stanowi publikacja M. Jafari, M. Wawrzyniak-Adamczewska, S. Stagraczyński, A. Dyrdał, J. Barnaś, *Spin valve effect in two-dimensional VSe₂ system*, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **548** (2022) 168921; DOI:10.1016/j.jmmm.2021.168921, dalej określana jako [IV]. Dotyczy ona właściwości transportowych, a w szczególności magnetooporu, wykazywanych przez dwuwarstwę VTe₂ (zarówno w strukturze T, jak i H). Badania przeprowadzono przy użyciu tego samego pakietu, co w poprzednich pracach, uzupełniając wyniki o obliczenia oparte na formalizmie nierównowagowych funkcji Greena. Na początku scharakteryzowano strukturę elektronową ferro- i antyferromagnetycznych faz dwuwarstwy VSe₂ (o tej samej lub przeciwnej polaryzacji magnetycznej obu monowarstw) dla obu jej struktur. Dalsze rozważania dotyczą magnetooporu i odpowiadają geometrii nanowstążki. Oprócz samego magnetooporu, wyniki zawierają również

wartości magnetooporu cieplnego (zdefiniowanego na podstawie współczynnika przewodnictwa cieplnego) oraz współczynnika efektywności termoelektrycznej ZT , dla różnych temperatur, obliczone w funkcji poziomu Fermiego. Ogólnie stwierdzić można, że faza H powinna wykazywać znacznie większy magnetoopór niż faza T.

Ostatni rozdział poświęcony jest efektom bliskości w heterostrukturze van der Waalsa złożonej z grafenu i CrI_3 z niezerowym kątem skręcenia. Rozdział opiera się na preprincie M. Jafari, M. Gmitra, A. Dyrdał, *Exchange and spin-orbit proximity driven topological and transport phenomena in twisted graphene/ CrI_3 heterostructures*, arXiv preprint arXiv:2509.11670 (2025); DOI:10.48550/arXiv.2509.11670. Obliczenia przedstawione w tej pracy wykonano przy użyciu pakietu Quantum ESPRESSO. Badania rozpoczyna porównanie struktury elektronowej dla układu z zerowym i niezerowym kątem skręcenia (przy czym zastosowanie niezerowego kąta pozwala sprowadzić położenie stożka Diraca w pobliże poziomu Fermiego, podczas gdy dla struktury nieskręconej grafen wykazuje znaczne domieszkowanie typu p, a położenie stożka nakłada się na wiele innych pasm). W szczególności zilustrowano ciekawą teksturę spinu w pobliżu punktów K/K'. Stwierdzono znaczny wpływ kąta skręcenia na energię anizotropii magnetycznej dla CrI_3 (która jednak jest istotnie niższa w heterostrukturze niż w izolowanej monowarstwie). Następnie opisano strukturę elektronową grafenu w pobliżu punktów K/K', konstruując efektywny model w przybliżeniu k-p, uwzględniający człon opisujący różne wkłady do oddziaływania spin-orbita (w tym typu Rashby z dodatkowym kątem obrotu) oraz potencjał zależny od podsięci i oddziaływanie z polem wymiany. Należy zauważyć, że wartości energii parametryzującej człon wymiany są znacząco większe niż w innych badanych układach tego typu. Sam model wykazuje dobry poziom zgodności z wynikami obliczeń DFT, zarówno dla wartości energii, jak i wszystkich 3 rzutów spinu w pobliżu punktów K/K'. Dalsze rozważania dotyczyły właściwości topologicznych stanów elektronowych w strukturze wykazującej skręcenie (stan izolatora wykazuje nietrywialne właściwości topologiczne). Przedmiotem zainteresowania była anomalna przewodność Halla, jako że układ wykazuje anomalny kwantowy efekt Halla (jak również anomalny efekt Nernsta). Należy dostrzec, że wartość przerwy energetycznej w punkcie K i K' różni się, co pozwala na selektywne zamykanie przerwy i realizację przewodnictwa tylko w jednej z dolin. W obliczeniach rozseparowano wkłady do anomalnej przewodności Halla i Nernsta pochodzące od dolin K/K' w strukturze elektronowej. W końcowej części pracy odniesiono się do naprężeń dwuosiowych. Poprzednio dyskutowane wyniki uzyskano bowiem dla przypadku, kiedy naprężenie jest obecne tylko w grafenie (w celu dostosowania do stałej sieci CrI_3 w superkomórce). Porównawczo zbadano sytuację, kiedy naprężenie jest obecne tylko w CrI_3 – stwierdzono, że w tym drugim przypadku stan podstawowy w CrI_3 jest antyferromagnetyczny, a to znacząco wpływa na efekty bliskości w grafenie (który staje się trywialnym izolatorem i nie wykazuje anomalnego efektu Halla).

Przedstawione publikacje [I-V] kończy zwięzłe wspólne podsumowanie. Końcowa część rozprawy zawiera również szczegółowy wykaz osiągnięć naukowych Autora (publikacje,

prezentacje konferencyjne i inne formy aktywności) oraz oświadczenia współautorów dotyczące ich wkładu w publikacje, a także odniesienia do kwestii praw autorskich dla umieszczonych we wprowadzeniu ilustracji reprodukowanych z publikacji.

Powoływana w rozprawie bibliografia (nie licząc cytowań zawartych w samych pracach [I–V]) jest bardzo obszerna i liczy łącznie aż 441 pozycji. Oceniam ją jako zdecydowanie wyczerpującą. Z obowiązku recenzenta zauważam, że w wykazie literatury występują problemy z konsekwentnym używaniem wielkich liter (zwłaszcza w tytułach artykułów i nazwach czasopism).

Pracę zamyka bardzo wartościowy dodatek merytoryczny, zawierający szczegółowy opis wszystkich pakietów oprogramowania używanych do uzyskania publikowanych w rozprawie wyników (a więc Quantum ESPRESSO, Quantum ATK, Wannier90, WannierTools, Vampire czy TB2J) i wyjaśnienie ich roli w przeprowadzonych badaniach.

Wprowadzenie do publikacji [I–V] przygotowane przez Autora oceniam jako bardzo wartościowe, logiczne skonstruowane i mające walory pedagogiczne; szczegółowo i kompetentnie wyjaśnia ono metodologię pracy. Jego konstrukcja i zawartość świadczy dobrze o świadomości Autora w zakresie fizyki stanowiącej podstawę wykonywanych obliczeń. Dowodzi ono posiadania przez Kandydata ogólnej wiedzy teoretycznej w dyscyplinie nauki fizyczne. Język rozprawy oceniam pozytywnie; napotykane drobne błędy nie rzutują na tę ocenę i nie utrudniają lektury.

Publikacje wchodzące w skład cyklu zawierają interesujące wyniki, są wartościowe i dowodzą umiejętności badawczych kandydata oraz dobrej orientacji we współcześnie rozwijanych obszarach badawczych fizyki materii skondensowanej.

Lektura publikacji [I–V] tworzących rozprawę zainspirowała mnie do przedstawienia pewnych pytań, uwag i komentarzy, które wymieniam poniżej:

W kontekście pracy [I] nasuwa się uwaga, że bardzo interesujące byłoby zilustrowanie przestrzennego rozkładu momentu magnetycznego dla badanych przypadków, aby określić na jakich atomach jest zlokalizowany. Można by także uzupełnić wyniki o schematyczne rysunki z podaniem długości różnych wiązań (w przypadku o niższej symetrii niż samo podstawienie 1 atomu Si atomem Cr).

Dla pracy [II], wartościowe byłoby podanie (np. w powoływanej tabeli 2) wartości różnic energii pomiędzy poszczególnymi stanami magnetycznymi oraz zamieszczenie schematycznego rysunku badanych uporządkowani antyferromagnetycznych (zwłaszcza, że badanie uporządkowana antyferromagnetycznego w płaszczyźnie wymaga użycia superkomórki).

Jeśli chodzi o wartości anizotropii w płaszczyźnie, wyrażone w tabeli 3 w pracy [II] w neV, to pojawia się pytanie, czy taka różnica energii jest fizycznie istotna w świetle przyjętych kryteriów zbieżności energii całkowitej w obliczeniach. Sądzę, że definicja energii anizotropii w płaszczyźnie mogłaby tu wymagać modyfikacji np. w zgodzie z wyrażeniem na s. 170 w: J. M. D. Coey, *Magnetism and Magnetic Materials*, Cambridge University Press, Cambridge (2010) (zależność energii od kąta w płaszczyźnie). Ponadto, na wykresie 3, na osi pionowej jest odłożona nie tyle sama energia anizotropii, co różnica energii w funkcji kąta.

W kontekście wykresu 3 w pracy [II] nasuwa się pytanie, czy byłoby możliwe dopasowanie zależności tej różnicy energii od kąta do przedstawionych danych, tak aby wyznaczyć stałe anizotropii K różnego rzędu [zob. np. B. D. Cullity, C. D. Graham, *Introduction to Magnetic Materials* 2nd Edition, Wiley-IEEE Press (2008) lub J. M. D. Coey, *Magnetism and Magnetic Materials*, Cambridge University Press, Cambridge (2010)].

W odniesieniu do wyników modelowania właściwości magnetycznych w pracy [II], nasuwa mi się pytanie, jak można by skomentować pochodzenie wyrazów opisujących anizotropię magnetyczną dla hamiltonianu układu spinów zlokalizowanych $1/2$?

W związku z pracą [III], cenne byłoby dokładniejsze wyjaśnienie, w jaki sposób wybrano ostateczną wartość U do obliczeń. Ponadto, interesujące jest, jaki rozkład spinów ma faza antyferromagnetyczna w badanym materiale (warto by to zilustrować na rysunku). W tej publikacji ciekawe byłoby również wyjaśnienie istoty metody RPA użytej do szacowania temperatury krytycznej. Tu narzuca się również uwaga, że model na sieci dwuwymiarowej z izotropowymi oddziaływaniami nie powinien wykazywać uporządkowania w skończonej temperaturze; istotną rolę w pojawianiu się uporządkowania w takim układzie odgrywa zarówno anizotropia oddziaływań w przestrzeni spinu, jak i inne wkłady do anizotropii. Można by także zadać pytanie, czy wyznaczona energia anizotropii jednojonowej mogłaby być włączona do hamiltonianu, aby ulepszyć oszacowanie temperatury krytycznej.

W pracy [IV], ciekawym i wartościowym uzupełnieniem byłoby podanie różnic energii całkowitej pomiędzy różnymi fazami ferro- i antyferromagnetycznymi dwuwarstwy VSe_2 . Pożądane byłoby także wyjaśnienie, jaka jest dokładna geometria (np. rozmiary) badanej nanowstążki (początek sekcji 2 pracy [IV] zawiera jedynie bardzo lapidarne wyjaśnienie), jako że poprzednia część pracy dotyczy nieskończonego układu dwuwymiarowego, a taki przeskok jest nieco nieoczekiwany. Ciekawe byłoby również porównane struktury elektronowej tej nanowstążki z nieskończoną warstwą.

W kontekście układu rozważanego w pracy [V], nasuwa się pytanie, czy dałoby się na podstawie przeprowadzonych obliczeń powiedzieć coś o rozkładzie momentu magnetycznego w warstwie CrI_3 w heterostrukturze z zerowym i niezerowym kątem skrętu.

Chciałbym zaznaczyć, że wymienione uwagi, pytania i komentarze nasuwające się w nawiązaniu do publikacji cyklu, nie umniejszają mojej pozytywnej oceny merytorycznej dotyczącej przedstawionej rozprawy i wartości opublikowanych wyników.

Oprócz prac wchodzących w skład przedłożonej rozprawy doktorskiej, Kandydat posiada również inny dorobek publikacyjny, w chwili obecnej złożony z 4 prac opublikowanych w czasopiśmie i 1 preprintu.

Część tego dorobku Doktoranta obejmuje modelowanie teoretyczne właściwości nanoukładów w oparciu o formalizm DFT. Do tego nurtu zaliczyć można pracę M. Jafari, A. Kordbacheh, S. Mahdian, N. Ghasemi, *Electronic and transport properties of (6,2) carbon and silicon nanotubes: A first-principles calculation*, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **117** (2020) 113855; DOI:10.1016/j.physe.2019.113855, analizującą właściwości elektronowe nanorurek węglowych i silicenowych. Doktorant jest również współautorem publikacji M. Jafari, A. Dyrdał, *First Principle Study on Electronic and Transport Properties of Finite-Length Nanoribbons and Nanodiscs for Selected Two-Dimensional Materials*, *Molecules* **27** (2022) 2228; DOI:10.3390/molecules27072228, poświęconej modelowaniu właściwości strukturalnych, elektronowych i transportowych nanostruktur (nanodysków i nanowstążek skończonych rozmiarów) złożonych z grafenu, silicenu lub heksagonalnego azotku boru.

Do tematyki rozprawy doktorskiej (a konkretnie do pracy [III]) nawiązuje bezpośrednio preprint M. Jafari, N. Rahmani-Ivriq, A. Dyrdał, *Effect of Fe-doping on VS₂ monolayer: A first-principles study*, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2411.12001>, zawierający wyniki obliczeń DFT dla monowarstwy VS₂ domieszkowanej atomami żelaza (m.in. dotyczących energii anizotropii magnetycznej czy właściwości optycznych). Na obliczeniach w ramach formalizmu DFT oparta jest również praca W. Rudziński, M. Jafari, J. Barnaś, A. Dyrdał, *Magnon-plasmon coupling mediated by linear magnetoelectric effect in two-dimensional crystals with Dzyaloshinskii-Moriya interaction*, opublikowana w *Physical Review B* (DOI:10.1103/nft-yhmv) [preprint <https://doi.org/10.48550/arXiv.2506.11834> (2025)], gdzie autorzy analizują wzbudzenia w postaci magnonów i plazmonów i ich oddziaływanie w dwuwarstwie VSe₂/NbSe₂ (w którym to układzie zaindukowane zostaje znaczące oddziaływanie Dzialoszyńskiego-Moriyi).

Zainteresowania układami magnetycznymi u Doktoranta dowodzi również praca S. Stagraczyński, P. Baláž, M. Jafari, J. Barnaś, A. Dyrdał, *Magnetic ordering and dynamics in monolayers and bilayers of chromium trihalides: atomistic simulations approach*, *Scientific Reports* **14** (2024) 25552; DOI:10.1038/s41598-024-75501-2 zawierająca obliczenia właściwości magnetycznych dla mono- i dwuwarstw CrI₃ (tym razem oparte na formalizmie równania Landaua-Lifszycy-Gilberta i metodach Monte Carlo).

Należy zatem dostrzec zauważalny dorobek naukowy nie należący do rozprawy doktorskiej, obejmujący interesujące zagadnienia fizyki materiałów dwuwymiarowych, w tym w dużym stopniu nowoczesnych materiałów magnetycznych.

Wszystkie prace kandydata uzyskały dotychczas 69 cytowań (Google Scholar), w tym 46 dotyczy prac składających się na rozprawę (praca [II] zgromadziła 17 cytowań, praca [IV] – 12 cytowań). Wg. bazy Scopus liczba cytowań całości dorobku wynosi 43. Są to bardzo dobre wskaźniki, świadczące o zainteresowaniu środowiska publikowanymi badaniami i o aktualności podjętej tematyki.

Rozprawa zawiera szczegółową informację o aktywności Doktoranta w zakresie popularyzacji swoich wyników. Wynika z niej, że Kandydat prezentował swoje wyniki podczas licznych międzynarodowych konferencji, warsztatów i sympozjów, takich jak 9th International Conference on "Nanomagnetism and Spintronics" (Sol-SkyMag 2025), Van der Waals Materials for Nanoelectronics w 2025 r., 2D Quantum Materials for Spintronics 2024, The European Conference Physics of Magnetism 2023 i 2021, Magnonics 2023, MagIC+ Workshop: Magnetism, Interactions and Complexity w 2023 r. i 2021 r., Joint European Magnetic Symposia 2023 i 2022. Wygłaszał także referaty na seminariach w jednostce macierzystej oraz w Koszycach. Dobrze świadczy to o aktywności Doktoranta w zakresie upowszechniania swoich wyników w środowisku i poddawania ich szerszej dyskusji. Kandydat uczestniczył również w warsztatach dedykowanych pogłębianiu kompetencji w zakresie użytkowania narzędzi obliczeniowych opartych na formalizmie DFT. Ponadto, w 2023 r. Doktorant odbył kilkumiesięczny staż pod opieką dr. Martina Gmitry w Uniwersytecie Pavla Jozefa Šafárika w Koszycach (Słowacja). Warto również nadmienić, że Kandydat jest kierownikiem projektu badawczego projekt NCN PRELUDIUM 23 pt. „Elektronowe i magnetyczne własności dwuwymiarowych kryształów jodków metali przejściowych enkapsulowanych grafenem” (2024/53/N/ST3/02621; okres realizacji 2025–2028).

Tematyka przedłożonej rozprawy mieści się bez wątpienia w nurcie najintensywniej badanych zagadnień fizyki materii skondensowanej, dotycząc nowoczesnych materiałów dwuwymiarowych (samo określenie heterostruktury van der Waalsa jest tu zdecydowanie zawężające). Ich zastosowania mogą w szczególności obejmować obszar rozwijającej się spintroniki, co konkretyzuje ich potencjał aplikacyjny. Przedmiotem badań stały się zarówno jednowarstwy o właściwościach kontrolowanych domieszkowaniem, jak i dwuwarstwy dichalkogenków wanadu oraz heterostruktura CrI_3 /grafen (w kontekście twistroniki). Na podkreślenie zasługuje staranny dobór metod badawczych, opartych przede wszystkim a formalizmie DFT, ale uwzględniających także podejścia pozwalające badać właściwości magnetyczne (w tym m.in. metody Monte Carlo) czy transportowe. Uzyskane wyniki stanowią z

pewnością rozwiązanie postawionego problemu naukowego w ramach wybranego zakresu metod badawczych.

Z przedłożonej rozprawy wnioskuję, że Doktorant jest kompetentnym użytkownikiem narzędzi obliczeniowych implementujących formalizm DFT, ale także narzędzi uzupełniających obraz fizyczny badanych układów. Przy ich zastosowaniu uzyskuje wartościowe wyniki dotyczące właściwości fizycznych bardzo interesujących układów niskowymiarowych oraz kompetentnie je analizuje. Dowodzi to umiejętności samodzielnego prowadzenia pracy naukowej w obszarze obliczeniowej fizyki fazy skondensowanej. Całokształt dorobku naukowego świadczy pewnością o potencjale naukowym Kandydata.

Podsumowując, jednoznacznie stwierdzam, że przedstawiona przez Pana mgr. Mirali Jafari rozprawa p.t. *Electronic, magnetic and transport properties of selected van der Waals heterostructures* stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego. Rozprawa ta prezentuje ogólną wiedzę teoretyczną Kandydata w dyscyplinie nauki fizyczne oraz dowodzi umiejętności samodzielnego prowadzenia przez niego pracy naukowej w tym zakresie. Spełnia zatem wszystkie wymagania stawiane przez ustawę z dn. 18 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (określone przez art. 187 ustawy). Wnoszę zatem do Komisji Doktorskiej powołanej przez Radę Naukową Dyscyplin Nauki Fizyczne i Astronomia w Uniwersytecie im. Adama Mickiewicza w Poznaniu o dopuszczenie Pana mgr. Mirali Jafari do dalszych etapów postępowania w sprawie nadania stopnia doktora w dyscyplinie nauki fizyczne, w tym do obrony rozprawy doktorskiej.

Kerol SzeToushi

