

Łódź, dn. 03.04.2023 r.

**dr hab. Karol Szałowski, prof. UŁ**

Katedra Fizyki Ciała Stałego  
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej  
Uniwersytet Łódzki

## **Recenzja rozprawy doktorskiej Pana mgr. Ghulama Hussaina**

### ***p.t. Investigating the electro-optical properties of 3D superlattices and 2D materials: A DFT study***

Przedstawiona przez Autora rozprawa doktorska powstała w Międzynarodowym Centrum Sprzężenia Magnetyzmu i Nadprzewodnictwa z Materią Topologiczną – MagTop w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie. Promotorem jest dr hab. Carmine Autieri, prof. IF PAN (Instytut Fizyki PAN w Warszawie), rolę promotora pomocniczego pełni dr Giuseppe Cuono (Instytut Fizyki PAN w Warszawie). Rozprawa przyjmuje formę zbioru opublikowanych i powiązanych tematycznie artykułów naukowych, czym spełnia wymagania określone w art. 187 ust. 3 i 4 ustawy z dn. 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce<sup>1</sup>.

Na rozprawę składają się 4 prace współautorskie (łącznie 5-7 autorów), opublikowane w 2022 r. w czasopismach z listy Journal Citation Reports (znajdujących się również w wykazie o którym mowa w art. 186 ust. 1 ustawy – por. komunikat Ministra Edukacji i Nauki z dnia 1 grudnia 2021 r. w sprawie wykazu czasopism naukowych i recenzowanych materiałów z konferencji międzynarodowych). Jeden z artykułów ukazał się w prestiżowym czasopiśmie *Applied Surface Science* (o Impact Factorze równym 7,932 za rok 2021), pozostałe w *Journal of Physics D: Applied Physics* (IF równy 3,409), *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* (IF równy 3,369) oraz *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* (IF równy 3,097). Są to czasopisma o ustalonej renomie w zakresie fizyki fazy skondensowanej – fizyki nanostruktur, układów niskowymiarowych i fizyki powierzchni. Należy zatem ocenić dobór czasopism jako trafny.

---

<sup>1</sup> t.j. Dz. U. z 2022 r., poz. 574, ze zm.

W każdej z prac wchodzących w skład przedłożonej rozprawy Doktorant jest pierwszym autorem. Ponadto, na podstawie załączonych oświadczeń Doktoranta oraz każdego ze współautorów (w tym promotora i promotora pomocniczego), stwierdzić można wiodącą rolę Doktoranta w przedstawionych pracach.

Przedmiot zainteresowań Autora rozprawy stanowią trzy wyodrębnione grupy nowoczesnych materiałów: trójwymiarowe supersieci  $\text{InAs}/\text{InAs}_{0,625}\text{Sb}_{0,375}$ , dwuwymiarowe heterostrukтуры  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{WSi}_2\text{N}_4$  i  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{TiSi}_2\text{N}_4$  oraz monowarstwowe  $\text{MoGeSiP}_2\text{As}_2$  i  $\text{WGeSiP}_2\text{As}_2$  o charakterze janusowym. Zasadniczym celem przeprowadzonych obliczeń jest przewidywanie właściwości optycznych z punktu widzenia skonkretyzowanych zastosowań w detektorach podczerwieni, a co za tym idzie, szczegółowa analiza przede wszystkim struktury elektronowej (skupiona na przerwie energetycznej) oraz właściwości związanych z zespoloną, zmiennopolową podatnością elektryczną. Dla trzeciej z grup badanych struktur badania uzupełnia analiza właściwości istotnych w spintronice. Same obliczenia Autor wykonał z użyciem uznanego narzędzia, jakie stanowi program Vienna Ab initio Simulation Package (VASP), rozwijany od ponad 30 lat. Wybór ów należy ocenić jako dobrze uzasadniony.

Wspomniane 4 publikacje Autor dosyć zręcznie uzupełnił tworząc strukturę rozprawy, poprzedzając je rozdziałem o charakterze ogólnego wprowadzenia wyjaśniającego motywację zainteresowania badanymi układami oraz rozdziałem poświęconym metodologii badań i metodom badawczym, a kończąc wspólnymi konkluzjami. Napisana w języku angielskim treść poprzedzająca publikacje Doktoranta (które zostały wyodrębnione jako swoiste podrozdziały w rozdziale 3 tak skonstruowanej rozprawy) liczy łącznie 24 strony numerowane; osobno występuje także wykaz literatury powoływanej we wprowadzeniu oraz wykaz zawartych w nim grafik. Zgodnie z wymogami ustawy, rozprawa opatrzona jest streszczeniem w języku polskim oraz angielskim.

Wstęp otwiera krótkie wyjaśnienie celu rozprawy i zawartości składających się na nią publikacji. W dalszej części wstępu Autor wyjaśnia podział zakresu widma podczerwieni, w nawiązaniu do celu badań. Następnie przedstawia bardzo obszernie i interesująco szczegółowy rys historyczny, osadzając swoje badania dotyczące supersieci w bardzo szerokim kontekście prac dotyczących detekcji promieniowania podczerwonego. Czyni to skupiając uwagę na ewolucji samych detektorów i konkretnych rozwiązań technicznych w powiązaniu z rozwojem wiedzy o materiałach półprzewodnikowych odpowiednich do takich zastosowań i uwypuklając aspekty aplikacyjne oraz cechy użytkowe poszczególnych rozwiązań materiałowych. Jako jedną z alternatyw dla  $\text{HgCdTe}$ , stanowiącego swoisty kamień milowy w dziedzinie detekcji podczerwieni [por. np. A. Rogalski, Rep. Prog. Phys. **68** (2005) 2267], wskazuje właśnie supersieci  $\text{InAs}/\text{GaInSb}$ .

Kolejny etap wstępu prezentuje potencjał zastosowań przejawiany przez rozmaite klasy materiałów dwuwymiarowych, takie jak dichalkogenki metali przejściowych, dyskutując dalej

układy bardziej skomplikowane - hybrydowe materiały dwuwymiarowe oraz materiały w postaci monowarstw janusowych, wspominając ostatnie osiągnięcia w zakresie ich syntezy. Tutaj opis i dyskusja rys. 1.4. mogłyby zostać uzupełnione o stwierdzenie, że przedstawiono monowarstwy typu 2H [brak też odniesienia w tekście do panelu (a) tego rysunku]. Rozdział wstępny zamyka zapowiedź treści kolejnych części pracy.

Rozdział drugi Autor poświęca na omówienie formalizmu teoretycznego i metodologii przeprowadzonych obliczeń. Jego początek stanowi prezentacja ogólnego problemu w fizyce ciała stałego – zagadnienia układu wieloelektronowego opisanego hamiltonianem uwzględniającym elektrony i jądra atomów, oraz wyjaśnienie naturalnego w tym kontekście przybliżenia Borna-Oppenheimera. Dalsze rozważania prowadzą do sformułowania podejścia Hartree-Focka i, ogólnie, służą dyskusji redukcji opisu wielocząstkowego do opisu jednocząstkowego w efektywnym potencjale. Dyskutując wzór 2.7 można by podać, dla lepszej przejrzystości, pełną formę wyznacznika Slatera; w kontekście następującego po wzorze zdania nie jest w pełni jasne, jak przejść od orbitali jednoelektronowych do funkcji falowej stanu podstawowego. Autor nie wyjaśnia również znaczenia współczynników  $C$  w równaniu 2.9 czy symboli  $\eta$  w równaniu 2.10; nie zawsze jasne są odniesienia do  $\phi_i$  oraz  $\phi_{i\dots N}$  (por. równanie 2.10 w kontekście poprzedzającego je zdania). Opisana część stanowi wprowadzenie do dyskusji właściwej metody funkcjonałów gęstości, w oparciu o fundamentalne wyniki uzyskane przez Kohna, Hohenberga i Shama. Autor zarysowuje równania Kohna-Shama, a następnie dyskutuje podejścia do wyznaczenia funkcjonału korelacyjno-wymiennego występującego w owych równaniach. Są to: przybliżenie lokalnej gęstości oraz uogólnione przybliżenie gradientowe (gdzie wspomniano o implementacjach w ramach przybliżenia Perdewa-Burke'a-Ernzerhofa czy Perdewa-Wanga) oraz o innego rodzaju (hybrydowych) sformułowaniach potencjału korelacyjno-wymiennego. W tym kontekście nasuwa mi się uwaga, że w pełni zasadne byłoby podanie w tym miejscu formy potencjału Beckego-Johnsona używanego przez Autora w opublikowanych obliczeniach (praca 1). Podobnie, można by rozszerzyć rozdział o podanie postaci używanego funkcjonału hybrydowego HSE06 (Heyda-Scuserii-Ernzerhofa) oraz o samo wyjaśnienie skrótu HSE (praca 2,3). Kolejna część rozdziału metodologicznego opisuje przybliżenie fal płaskich i konieczne w jego ramach parametry obciążenia, a następnie motywację wprowadzenia pseudopotencjału i jego konstrukcji w ramach koncepcji *projector augmented wave* (PAW). Omówiona partia rozdziału wyjaśnia zatem, zazwyczaj z należyтым poziomem szczegółowości, formalizm teoretyczny stanowiący uniwersalną podstawę wykonanych obliczeń, wraz z dyskusją niezbędnych założeń upraszczających, co czyni Autora świadomym użytkownikiem wybranego narzędzia obliczeniowego. W świetle zawartości publikacji tworzących rozprawę, obejmujących także niekiedy wyznaczenie zależności dyspersyjnej dla fononów i pewne oparte na niej dalsze obliczenia termodynamiczne, cenne byłoby jednak uzupełnienie tego rozdziału metodologicznego o wyjaśnienie zagadnień związanych z obliczeniami dla fononów dokonywanymi na bazie DFT (w oparciu o pakiet PHONOPY).

Rozdział trzeci grupuje 4 publikacje Autora, wyróżnione formalnie jako podrozdziały i poprzedzone wspólnym krótkim omówieniem kluczowych wyników; każdą z prac również zaopatrzone w osobne, zwarte wprowadzenie. Oceniam pozytywnie taką strukturę, jako służącą spójności i ułatwiającą lekturę całości rozprawy doktorskiej.

Pierwsza z publikacji Autora (w *Journal of Physics D: Applied Physics*) poświęcona jest prezentacji i dyskusji wyników obliczeń własności supersieci trójwymiarowych  $\text{InAs}/\text{InAs}_{0,625}\text{Sb}_{0,375}$  o orientacji (001), składających się w kierunku wzrostu z 26 komórek elementarnych  $\text{InAs}$  i 8 komórek elementarnych  $\text{In}(\text{As},\text{Sb})$ . Po wstępie przedyskutowany zostaje wybór szczegółowych metod obliczeniowych, np. kwestia uwzględnienia oddziaływania spin-orbita, a także kwestia wyboru potencjału korelacyjno-wymiennego. Omawiając wyniki dla supersieci trójwymiarowych, można by wspomnieć o procedurze relaksacji położenia atomów dla badanego dużego układu – myślę, że warto to omówić podczas obrony. Jako punkt odniesienia Autor przeprowadził najpierw obliczenia dla materiału masywnego  $\text{InAs}$  oraz  $\text{InSb}$ , dyskutując wartość przerwy energetycznej i strukturę pasmową, a także własności optyczne, co stanowi zawartość pierwszych dwóch podjednostek podziału opublikowanej pracy. W szczególności, zostały wyznaczone masy efektywne nośników elektronowych i dziurowych dla poszczególnych pasm wzdłuż różnych kierunków w przestrzeni wektora falowego, porównane z wynikami literaturowymi o charakterze teoretycznym i eksperymentalnym. W kontekście omawianej publikacji, warto, aby Doktorant wyjaśnił podczas obrony cechy supersieci III rodzaju tam wspomnianej (w analogii do wyjaśnienia cech supersieci II rodzaju w rozdziale 1.1).

Kolejną część pierwszej publikacji rozpoczyna omówienie właściwych wyników dla supersieci, przy czym wzięto pod uwagę struktury o trzech stałych sieci: czystego  $\text{InAs}$ , czystego  $\text{InSb}$  oraz czystego  $\text{GaSb}$  w temperaturze 300 K, co prowadzi do naprężeń w uzyskanej supersieci. Należy zaznaczyć, że rozważany układ zawierał wiele atomów, stanowiąc spore wyzwanie obliczeniowe. Ponownie wyznaczono strukturę pasmową, w tym anizotropowe masy efektywne nośników, stwierdzając kluczowy wpływ wartości stałej sieci w płaszczyźnie na wartości tych mas i przerwy energetycznej. Przewidziano również uformowanie dwóch pasm ciężkodziurowych, w przeciwieństwie do sytuacji w materiale litym, a także stwierdzono występowanie innych różnic w stosunku do materiału litego (wynikających przede wszystkim z wyraźnie zaznaczonej anizotropii układu), w tym różnego stopnia lokalizacji dziur i elektronów. Dalsza część służy szerokiemu opisaniu rezultatów dotyczących właściwości optycznych – wynikających z zespolonej przenikalności elektrycznej, która w badanym układzie również wykazuje wyraźną anizotropię (część wykresów w suplementach). Jedną z cech supersieci jest podwyższony w stosunku do materiału litego jednorodny współczynnik absorpcji. Zakończenie zawiera interesujące omówienie czynników, których uwzględnienie mogłoby poprawić jakość uzyskanych przewidywań (np. możliwości użycia równania Bethego-Salpetera), oraz fizyczności pewnych założeń, takich jak jednorodność naprężeń, co świadczy dobrze o krytycznym stosunku Autora do wyników. Jest tam również zawarta dyskusja dalszych wyzwań obliczeniowych. Opublikowane materiały dodatkowe

zawierają cenne wyjaśnienia metodologiczne (w kontekście przeprowadzenia przez Autora obliczeń właściwości optycznych, opartych na zespolonej przenikalności elektrycznej, wyjaśniony został sposób obliczania tej wielkości w oparciu o wyniki DFT oraz dalsze definicje odpowiednich diskutowanych parametrów optycznych). Oprócz tego, suplement prezentuje również procedurę doboru współczynnika  $c^{MBJ}$  w potencjale Beckego-Johnson. Stwierdzony wpływ naprężeń na właściwości supersieci otwiera drogę do inżynierii własności z punktu widzenia detekcji dalekiej podczerwieni.

Temat kolejnej z publikacji Doktoranta (w *Applied Surface Science*) dotyczy badań właściwości układów o charakterze dwuwymiarowym, zbudowanych z monowarstw materiałów o ogólnym wzorze  $MA_2Z_4$ , gdzie M jest metalem przejściowym, A pierwiastkiem grupy IV, a Z pierwiastkiem grupy V. W pracy badano heterostruktury o ułożeniu lateralnym i pionowym  $MoSi_2N_4/WSi_2N_4$  i  $MoSi_2N_4/TiSi_2N_4$ . Wstępny etap stanowiło określenie stabilności monowarstw  $MoSi_2N_4$ ,  $WSi_2N_4$  i  $TiSi_2N_4$ , przez ich relaksację strukturalną, a następnie obliczenie energii kohezji oraz wyznaczenie struktury fononowej. W każdym z przypadków potwierdzono stabilność analizowanych struktur. Taką samą stabilność potwierdzono dla heterostruktur  $MoSi_2N_4/WSi_2N_4$  oraz  $MoSi_2N_4/TiSi_2N_4$ . Analiza struktury elektronowej zawiera dyskusję gęstości stanów wraz z wkładem od poszczególnych pierwiastków oraz samej struktury pasmowej. Przerwa energetyczna heterostruktur  $MoSi_2N_4/WSi_2N_4$  odpowiada energii fotonów podczerwieni, podczas gdy dla  $MoSi_2N_4/TiSi_2N_4$  leży ona w zakresie światła widzialnego; odpowiednie przerwy dla monowarstw odpowiadają również światłu widzialnemu. Dla heterostruktur porównano wyniki uzyskane przy wykorzystaniu potencjału PBE oraz hybrydowego HSE (Heyd-Scuseria-Ernzerhof). Obliczono również typowe, wcześniej diskutowane właściwości optyczne, przede wszystkim dla tej struktury, która wykazuje potencjał zastosowań w detekcji podczerwieni. Przedstawione wyniki uzupełnia obliczenie energii swobodnej Helmholtza, entropii i ciepła właściwego przy stałej objętości. W kontekście zawartości tej publikacji, przydatne byłoby uzupełnienie rozdziału 2 o omówienie zagadnień obliczeń fononowych opartych na formalizmie DFT oraz przybliżeń użytych w modelowaniu energii swobodnej Helmholtza, entropii i ciepła właściwego.

Osobną publikację (w *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*) Autor poświęcił heterostrukturze  $MoSi_2N_4/WSi_2N_4$  (oraz, w nieco mniejszym stopniu,  $MoSi_2N_4/TiSi_2N_4$ ) o charakterze lateralnym; badania dotyczą tu wpływu naprężeń dwuosiowych na strukturę pasmową i właściwości optyczne, wskazując drogę modyfikacji wspomnianych cech materiałów przez dobór naprężeń (np. dobór podłoża do hodowli). W szczególności, naprężenie rozciągające zmniejsza wartość przerwy energetycznej, natomiast naprężenie ściskające najpierw wartość tej przerwy zwiększa, a potem powoduje przede wszystkim zmianę jej charakteru ze skośnego na prosty. Jest to związane z ze zmianą wkładu poszczególnych orbitali do stanów na szczycie pasma walencyjnego. Podobną w charakterze analizę przeprowadził Autor dla  $MoSi_2N_4/TiSi_2N_4$  (tutaj jedynie HSE odtwarza skośną przerwę energetyczną; ciekawe jest, że dla obliczeń wykonanych z użyciem potencjału hybrydowego przerwa energetyczna może się zamykać dla odpowiednio

silnego naprężenia ściskającego). Właściwości optyczne badanych struktur również są modyfikowalne naprężeniem dwuosiowym. Przeprowadzone obliczenia wskazują na istotność uwzględniania oddziaływania spin-orbita dla wiarygodnego przewidywania struktury elektronowej. W kontekście przeprowadzonych obliczeń, dyskutowana jest kwestia nierównoważności punktów punktów K1/K2 i M1/M2 dla supersieci – tu ciekawe byłoby przedyskutowanie schematu wyjaśniającego postać tej strefy w przestrzeni wektora falowego.

Monowarstwowe materiały janusowe stanowią wysoce obiecującą klasę materiałów niskowymiarowych i przedmiot intensywnego zainteresowania badaczy, co potwierdza m.in. obfitość prac przeglądowych opublikowanych w ostatnich latach na ten temat, skupionych przede wszystkim na strukturach typu MXY [W.-J. Yin i in., *Mater. Adv.* **2** (2021) 7543; L. Zhang i in., *J. Appl. Phys.* **131** (2022) 230902; X. Tang, L. Kou, *Phys. Stat. Sol. B* **259** (2022) 2100562; R. Li, Y. Cheng, W. Huang, *Small* **14** (2018) 1802091]. Kontynuując zainteresowanie materiałami dwuwymiarowymi, Doktorant przeprowadził obliczenia dla struktur janusowych typu  $MGeSiP_2As_2$ , gdzie M oznacza Mo lub W, których wyniki przedstawił w czwartej z publikacji (w *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*). Tutaj również przedmiotem zainteresowania stała się struktura fononowa i stabilność termodynamiczna, a także praca wyjścia i jej różnica pomiędzy obiema płaszczyznami terminującymi warstwę (jako że w badanych strukturach pojawia się elektryczny moment dipolowy prostopadły do płaszczyzny). Najbardziej interesujące są tu jednak obliczenia struktury elektronowej. W związku ze złamaniem symetrii inwersji (grupa symetrii dla badanych struktur janusowych to  $C_{3v}$ ), w badanych strukturach możliwe jest pojawienie się oddziaływania spin-orbita typu Rashby. W publikacji przedyskutowano wkład konkretnych orbitali atomów poszczególnych pierwiastków do struktury pasmowej oraz wyekstrahowano parametry rozszczepienia pasma walencyjnego i przewodnictwa, jak również oddziaływania spin-orbita typu Rashby w punkcie K (obecne tylko w strukturach janusowych). Co więcej, wykreślono orientację spinu w płaszczyźnie  $k_x-k_y$  w całej pierwszej strefie Brillouina, stwierdzając występowanie interesujących struktur chiralnych, a także przeanalizowano kontury stałej energii dla pasm walencyjnych w pobliżu punktu  $\Gamma$ , dyskutując wyniki w kontekście symetrii. Uzyskane rezultaty wykazują potencjał zastosowań w ramach spintroniki oraz dolinotroniki. Ciekawym rozszerzeniem przeprowadzonych prac mogłoby być zbadanie wpływu pola elektrycznego przyłożonego prostopadle do płaszczyzny, jak również modelowanie struktur pasmowych efektywnymi hamiltonianami typu ciasnego wiązania. W badaniach uzupełniających stwierdzono niestabilność dynamiczną monowarstw  $MoSnSiP_2As_2$  oraz  $MoPbSiP_2As_2$ . Tak jak we wcześniejszych pracach, również i w tej pracy Autor określił właściwości optyczne dla badanych materiałów.

Rozprawę zamykają lapidarne konkluzje, zbierające i rekapitulujące podstawowe wyniki uzyskane w 4 omówionych pracach.

Wykaz literatury powoływanej we wprowadzeniu liczy 148 pozycji. Z obowiązku recenzenta zauważam usterki dotyczące użycia dolnych indeksów w pisowni tytułów cytowanych prac oraz użycia wielkiej litery w tytułach czasopism, a także niekompletne dane (historycznej) pozycji 9 czy pozycji 44.

Oceniam, że całość wprowadzenia oraz uzupełnień zawartych przed poszczególnymi publikacjami kompetentnie prezentuje tło i motywacje podjętych badań, uzasadnia ich znaczenie dla fizyki materiałów i potencjał aplikacyjny, a wreszcie informuje o konkretnych układach, dla których przeprowadzono obliczenia przewidujące ich właściwości.

W kontekście lektury rozprawy nasuwają się pewne pytania i uwagi (zasadniczo już zasygnalizowane wcześniej w treści recenzji), które przedstawiam i rozszerzam poniżej.

Chciałbym, aby Doktorant w czasie obrony przedstawił postać oryginalnego potencjału zaproponowanego przez Beckego i Johnson (BJ) [A. D. Becke, E. R. Johnson, J. Chem. Phys. **124** (2006) 221101] oraz istotę jego modyfikacji (MBJ) dokonanej w pracy F. Tran. P. Blaha. Phys. Rev. Lett. **102** (2009) 226401. Pozwoliłoby to również wyjaśnić istotę parametru  $c^{\text{MBJ}}$  używanego w rozprawie.

Odnosząc się do efektywności potencjału MBJ w modelowaniu wartości przerwy energetycznej w półprzewodnikach, Doktorant mógłby również powołać pracę D. Koller, F. Tran, P. Blaha, Phys. Rev. B **83** (2011) 195134 poświęconą analizie stosowalności wspomnianego potencjału do różnych klas ciał stałych oraz fizycznego podłoża stwierdzonych wad i zalet metody, jak również pracę J. Camargo-Martínez, R. Baquero, Phys. Rev. B **86** (2012) 195106. Nowsza praca na analogiczny temat to: H. Abu-Farsakh, A. Qteish, Comput. Mater. Sci. **208** (2022) 111324. Chciałbym, aby Doktorant krótko omówił wspomniane zagadnienia stosowalności podczas obrony rozprawy. Zagadnienie stosowalności MBJ do układów niejednorodnych podnosi praca T. Rauch, M. A. L. Marques, S. Botti, J. Chem. Theory Comput. **16** (2020) 2654.

Proponowałbym, aby Doktorant wyjaśnił podczas obrony cechy supersieci III rodzaju tam wspomnianej (w analogii do wyjaśnienia supersieci II rodzaju w rozdziale 1.1). Chciałbym także, aby Doktorant przedstawił schematyczny rysunek pierwszej strefy Brillouina dla supersieci  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{WSi}_2\text{N}_4$ , gdzie odnośny schemat miałby szczególne znaczenie, wyjaśniając kwestię nierównoważności punktów K1/K2 i M1/M2.

Odnosząc się do wyników drugiej z publikacji, sugerowałbym, aby Doktorant wyjaśnił, na czym polega przybliżenie kwaziharmoniczne wykorzystywane w pakiecie PHONOPY, pozwalające obliczać takie wielkości termodynamiczne jak ciepło właściwe czy entropia dla ciał stałych.

W kontekście interesujących obliczeń dotyczących sprzężenia spin-orbita w strukturach janusowych, nasuwa mi się pytanie, czy w przebadanych strukturach można by się spodziewać

anizotropii współczynnika Rashby – innej jego wartości dla kierunku  $\Gamma$ -K i  $\Gamma$ -M (tak, jak to zostało przewidziane dla PtSSe, PtSTe i PtSeTe w pracy P. A. L. Sino i in., *Nanoscale Adv.* **3** (2021) 6608)?

Autor, tworząc rozprawę, nie ustrzegł się również pomyłek o charakterze czysto edytorskim, które wymienię z obowiązku recenzenta. Występują też niekiedy niekompletne czy niezręcznie sformułowane zdania. Przykładowo, we wzorze 2.12 brakuje wektora bra. Niekiedy występują średniki zamiast dwukropków (por s. 22). Na s. 8 niezręcznie brzmi zdanie „the d electrons varies from zero to six” (brzmiałoby lepiej stwierdzenie „number of d electrons”); na s. 16 niezręcznie brzmi „wave of functions”. Na s. 12 stwierdzenie dotycząca  $MA_2Z_4$  byłoby bardziej klarowne, gdyby użyte zostało „IV/V group element”. Zdarzają się też pomyłki językowe związane z niespójnością użycia liczby pojedynczej i mnogiej w zdaniu (np. na s. 24). Język, którym napisano rozprawę, oceniam ogólnie jako czytelny i służący sprawnemu komunikowaniu treści.

Przedstawione uwagi krytyczne nie umniejszają mojej pozytywnej oceny merytorycznej recenzowanej rozprawy doktorskiej.

Autor rozprawy zademonstrował umiejętność kompetentnego używania właściwie wybranego narzędzia obliczeniowego do przewidywania struktury elektronowej i wynikających z niej właściwości optycznych w zakresie światła widzialnego i podczerwieni dla szeregu supersieci trójwymiarowych oraz dla interesujących materiałów dwuwymiarowych. Uzyskane wyniki są oryginalne i wartościowe, wnosząc wkład do poznania fizyki nowoczesnych materiałów półprzewodnikowych, w tym zwłaszcza wykazujących potencjał zastosowań zarówno w zakresie optoelektroniki, jak i spintroniki i obszarów jej pokrewnych. Przedyskutowany w rozprawie obszerny materiał obliczeniowy świadczy o umiejętności prowadzenia przez Autora pracy naukowej w zakresie teorii fazy skondensowanej. Autor przekonująco uzasadnił dobór tematyki badawczej, osadzając ją w kontekście obecnego stanu wiedzy oraz dobrał właściwe narzędzia i metody badawcze aby osiągnąć postawione w rozprawie cele.

Prace stanowiące rozprawę doktorską uzyskały do chwili obecnej 25 cytowań (wg. bazy Scopus), co stanowi dobry wynik, uwzględniając ich opublikowanie w 2022 r.

Dorobek publikacyjny Doktoranta, oprócz 4 pozycji wchodzących w skład rozprawy doktorskiej, obejmuje także inne prace. Jedna z najnowszych publikacji Doktoranta, przygotowanych w ramach pracy w bieżącym zespole i dotyczących materiałów topologicznych, „Fast electrically switchable large gap quantum spin Hall states in  $MGe_2Z_4$ ”, dostępna jest w formie preprintu (<https://doi.org/10.48550/arXiv.2211.06443>). Inna praca dotycząca tej tematyki, „Correlation-Driven Topological Transition in Janus Two-Dimensional Vanadates”, ukazała się w tym roku w czasopiśmie *Materials*, a Doktorant jest jej pierwszym autorem. Kolejna praca, „Topological Phase Diagram of  $Pb_{1-x}Sn_xSe_{1-y}Te_y$  Quaternary Compound”, ukazała się w *Acta Physica Polonica A*.



Dodatkowo Doktorant jest współautorem pracy „Anisotropic phonon dispersion and optoelectronic properties of few-layer HfS<sub>2</sub>”, która ukazała się w bieżącym roku w prestiżowym *Journal of Materials Chemistry C* o Impact Factorze przekraczającym 8. Oprócz tego dorobek naukowy Kandydata wykazany w Google Scholar ([https://scholar.google.com.pl/citations?hl=pl&user=nVD6\\_7YAAAAJ](https://scholar.google.com.pl/citations?hl=pl&user=nVD6_7YAAAAJ)) obejmuje jeszcze inne prace z wcześniejszego okresu aktywności naukowej, dotyczące zagadnień spintroniki czy badań chalcogenków metali przejściowych, w czasopismach takich jak *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, *RSC Advances*, *Journal of Materials Chemistry C*, *Solid State Communications*, *Microelectronic Engineering*, *Superlattices and Microstructures* oraz *Microelectronic Engineering*, w których Doktorant jest wymieniany na dalszych miejscach na liście autorów; w tym np. prace przeglądowe „Recent advancements in 2D-materials interface based magnetic junctions for spintronics” w *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* (25 cytowań), „A review on Raman finger prints of doping and strain effect in TMDCs” w *Microelectronic Engineering* (43 cytowania) oraz „Chemical doping of transition metal dichalcogenides (TMDCs) based field effect transistors: A review” w *Superlattices and Microstructures* (26 cytowań).

Ogólny dorobek naukowy Doktoranta można zatem ocenić bardzo dobrze.

Wyniki uzyskane przez Doktoranta, zarówno w zakresie tematyki przedstawionej rozprawy jak i innych obszarów badawczych (powiązanych z nanodrutami oraz materiałami topologicznymi) stanowiły przedmiot prezentacji konferencyjnych - posterów na Międzynarodowej Szkole i Konferencji Fizyki Półprzewodników „Jaszowiec 2021” i „Jaszowiec 2022” oraz posteru podczas APS March Meeting 2023, jak również referatu ustnego na konferencji Nano-Pak 2021 "International E-conference on Emerging Trends and Innovations in Nanotechnology" (on-line) w Pakistanie.

**Podsumowując, jednoznacznie stwierdzam, że przedstawiona przez Pana mgr. Ghulama Hussaina rozprawa p.t. *Investigating the electro-optical properties of 3D superlattices and 2D materials: A DFT study* 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 Instytutu Fizyki PAN o dopuszczenie Pana mgr. Ghulama Hussaina do dalszych etapów postępowania w sprawie nadania stopnia doktora, w tym do obrony rozprawy doktorskiej.**

Kerol Szefowski