

Poznań, 7 lutego 2025 roku

Prof. dr hab. Maciej Krawczyk

Instytut Spintroniki i Informatyki Kwantowej

Wydział Fizyki, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

Recenzja pracy doktorskiej mgr Amar Fakhredine,

pt. *„Interplay between non-relativistic spin-splitting and spin-orbit coupling in metallic system”*,

przygotowanej w dyscyplinie nauki fizyczne,

w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie

pod kierunkiem prof. IF dra hab. Carmine Autieri i

dra Giuseppe Cuono

Praca doktorska magister **Amar Fakhredine**, pt. *„Interplay between non-relativistic spin-splitting and spin-orbit coupling in metallic system”* została przygotowana w dyscyplinie nauki fizyczne w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie pod kierunkiem prof. IF dra hab. Carmine Autieri i promotora pomocniczego dra Giuseppe Cuono. Praca doktorska została napisana w języku angielskim i liczy 109 stron.

Przedłożona praca doktorska została przygotowana w oparciu o cztery wieloautorskie publikacje naukowe współautorstwa mgr A. Fakhredine, opublikowane w renomowanych czasopismach. Prezentowane publikacje opatrzone są krótkim wstępem wprowadzającym w prezentowane w nich wyniki i opis udziału doktorantki w ich powstawaniu. Oprócz tych publikacji, w rozprawę włączone jest wprowadzenie do magnetyzmu, ze szczególnym zwróceniem uwagi na tematykę poruszaną w publikacjach oraz wprowadzenie do metody obliczeniowej, będącą podstawową metodą wykorzystywaną przez doktorantki. Praca opatrzona jest streszczeniem (w języku angielskim i polskim), zestawem oświadczeń współautorów publikacji, krótkim rozdziałem z dalszymi perspektywami badań i potencjalnych zastosowań oraz bibliografią składającą się z 105 pozycji, głównie z aktualnej literatury przedmiotu.

Tematem rozprawy są badania struktury elektronowej przy wykorzystaniu teorii funkcjonałów gęstości kilku cienkowarstwowych układów magnetycznych, tj. wielowarstwy $Rr/Co/Pt$, cienkiej warstwy Co oraz $CeAlSi$, oraz $CrAs$ będących materiałami o ciekawych właściwościach fizycznych i obiecującymi materiałami do różnych zastosowań. Badania koncentrują się na efektach związanych z oddziaływaniem spinowo-orbitalnym oraz złamaną symetrią inwersji przestrzennej czy odwrócenia w czasie.

Omówienie poszczególnych części rozprawy doktorskiej.

Tematyka wybrana do wprowadzenia, rozdział 1, została dobrze dobrana i przedstawia zarys podstawowych efektów i oddziaływań występujących w badanych materiałach i będących przedmiotem analizy w załączonych publikacjach, czyli oddziaływań spinowo orbitalnych, oddziaływania Dzyaloshinskii–Moriya, anomalnego efektu Halla, półmetali, a także występujących czy łamanych symetrii. Niestety, jest dużo błędów i niestaranności w przedstawionym materiale. Do najważniejszych zaliczam:

- Brak konsekwencji w pisowni symboli, tj. normalną czcionką czy kursywą, wielkości wektorowe z strzałką czy bez, tensory ze strzałką;
- Wielokrotne definiowanie tych samych skrótów, np. SOC, DMI (w całej pracy);
- Niekonsekwentne stosowanie wielkich liter, np. ‘Semimetals’;
- Nie jest jasne, jaki sens mają wprowadzone w równaniu (1.1) wielkości; czy są to skalary, co sugeruje forma zapisu?
- Błędna definicja diamagnetyzmu; definicja ferromagnetyzmu jest lakoniczna i nie dotycząca jego istoty;
- Rozmyte jest znaczenie spinu elektronu i spinu przypisanego do węzła sieci;
- Podpis pod rysunkiem 1 jest nieprecyzyjny;
- Jakość niektórych rysunków jest bardzo słaba, np. Fig. 1.2;
- Nie rozumiem dlaczego w definicji liczby topologicznej w równaniu (1.9) jest konkretna wartość, tj. ± 1 ;
- Co to jest wektor Néela?
- Wielkość ‘D’ wykorzystana np. na rys. 1.3 i 1.4 nie została jasno zdefiniowana. Jak ma się ona do ‘D_{ij}’ w równaniu (1.8);
- Wielkości z wzoru (1.10) nie zostały zdefiniowane;
- Jak się oblicza czy definiuje ‘chiral charge’ (Sec. 1.6) i jaki jest jego związek z krzywizną Berrego? Dlaczego przyjmuje zwykle wartości ± 1 ?
- Definicja skrótu ‘BZ’ występuje dopiero na ostatniej stronie wprowadzenia, a użycie już na stronie 9;
- Referencja [32] w odniesieniu do powierzchni Fermiego wydaje się nieadekwatna;
- Ostatnie zdanie rozdziału 1 wymagałoby wyjaśnienia.

W rozdziale drugim przedstawione są podstawy obliczeń z pierwszych zasad i omówione zostały podstawowe elementy teorii gęstości potencjału, które pozwalają zapoznać się z nią, nawet nie zaznajomionemu z obliczeniami DFT czytelnikowi. Niestety, również tutaj autorka nie ustrzegła się błędów różnego rodzaju:

- Przy podsekcji „Born Oppenheimer” brakuje myślnika i informacji, że jest to przybliżenie;
- Zbędny nawias ‘]’ w równaniu (2.5);

- Stwierdzenie przed równaniem (2.6), że „we have i electrons” jest niejasne;
- Warto wyjaśnić jak w praktyce wygląda algorytm metody samouzgodnionej;
- Nie jest jasne jak autorka wyznacza równowagowe położenie atomów, jak dokonuje relaksacji i jak włącza/wyłącza w obliczeniach SOC, elementy które są wykorzystywane w badaniach. W szczególności w pracy z Appl. Surf. Sci. stała sieciowa wydaje się być zadana w symulacjach, dlaczego i na ile jest to uproszczenie?
- We wzorze (2.13), σ i σ' powinny być jako indeksy dolne;
- Nie jest jasne dlaczego autorka pominęła, przynajmniej skrótowe opisanie metody PBE do wyznaczania funkcjonału XC, tym bardziej, że była ona stosowana w publikacjach stanowiących podstawę pracy doktorskiej;
- Przydałoby się wyjaśnienie wzoru (2.22) stanowiącego podstawę GGA;
- W podsekcji ‘Plane Wave’ wydaje się być rozmyte znaczenie periodyczności sieci krystalograficznej i superkomórki;
- W równaniu (2.24) brakuje indeksów ‘ik’ po lewej stronie;
- Brakuje odniesień literaturowych do omawianej metody PAW na stronie 21;
- Równanie (2.34) jest w nieadekwatnym położeniu;
- Podrozdział 2.4 jest w dużej części powtórzeniem informacji z 1.5. Wprowadzony jest tam model ciasnego wiązania, ale jak go powiązać z prowadzonymi symulacjami DFT nie zostało jasno opisane.

W rozdziale 3 zawarta jest jedna z dwóch pierwszo-autorskich publikacji kandydatki, w przygotowaniu których jej udział był dominujący. Praca ukazała się w 2023 roku w Journal of Applied Physics. Zaprezentowane zostały ciekawe wyniki obliczeń DFT w wielowarstwie Pt/Co/Re, pokazujące, że dodanie Re do układu Pt/Re pozwala zwiększyć oddziaływanie DMI. Ponad to, pokazano lokalne rozkłady tych oddziaływań i wpływ mieszania na międzywierzchniach na oddziaływanie DMI. Niestety, również w tej publikacji są nieścisłości, niejasności i brak staranności. Do najważniejszych zaliczam:

- Niezbyt ugruntowaną w pracy hipotezę „We believe that the usage of Re affects the total DMI of the whole system and enhances the Pt/Co contribution even though it is not a direct neighbor to Pt”. Tym bardziej, że jedno z kolejnych zdań „The origin of the system’s huge DMI was found to be purely interfacial while the contributions to the DMI from the inner layers are oscillating and, thus, become non-effective.” wydaje się przeczyć tej hipotezie. Może warto byłoby pokazać lokalny rozkład DMI dla dwuwarstwy Pt/Co, tak jak zostało to pokazane na Fig. 4 dla Pt/Co/Re?
- Błąd w referencji do rysunku w pierwszym akapicie prawej kolumny na str. 2 publikacji, na stronie 3 w sekcji A oraz na str. 5;

- Powtórzenie zdania „The DMI was calculated ...” w pierwszych dwóch akapitach na stronie 135 (prawa kolumna);
- Podkreślenie występowania plato między dwoma punktami obliczeniowymi (Fig. 3), wydaje się trochę na wyrost; zostały wskazane błędne jednostki w określeniu jego zakresu;
- Zdanie „The DMI shows a gradual variation from 3 to 4 mJ/m² as the rhenium thickness increases from 1 to 4 Ås” wymaga komentarza, gdyż z rysunku 4 wynika, że DMI maleje z 4 do ok. 3 mJ/m² przy zwiększaniu grubości. Dlaczego?
- By ułatwić wnioskowanie, warto by było dodać do Fig. 6 linię dla wielowarstwy z nieburzonymi granicami między materiałami. Jeśli bezpośrednio porównać wyniki rys. 6 z rys. 3 to wydaje się, że np. dla 0.6 nm Co idealna wielowarstwa ma znacznie niższe DMI niż Pt/Co/C'/Re. Co trochę podważa jeden z wniosków pracy.

Rozdział 4 zawiera wieloautorską pracę opublikowaną w Applied Surface Science pod koniec 2024 roku. Są w niej przedstawione bardzo ciekawe badania wielowarstwy Pt/Co/Pt, z cienką warstwą Re rozdzielającą Pt/Co. Zwiększenie wartości DMI, wynikające z obliczeń DFT przedstawionych już w poprzedniej pracy, zostało tutaj klarownie potwierdzone eksperymentalnie. Wkład kandydatki w tę publikację jest niewielki, gdyż związany jest z obliczeniami DFT, które są zawarte na Rys. 6. Dlatego w dalszej części omówię tylko tę małą część publikacji. Jak wynika z opisu rysunku, zostały wykorzystane tutaj wyniki z pracy poprzedniej (opublikowanej w JAP). Otrzymano bardzo dobrą zgodność wyników symulacji z eksperymentem co do wartości DMI w zależności od grubości Co, choć nie jest jasne dlaczego ograniczono symulacje tylko do małych grubości Co. Również nie jest wyjaśnione dlaczego w symulacjach nie odtworzono dokładnie badanej eksperymentalnie struktury, w której warstwa Re jest pokryta jeszcze Pt. Czy może to wnosić istotną różnicę do przedstawionych wyników? Wydaje się również, że dane eksperymentalne z Rys. 7, czyli zależność DMI od grubości Re, nie zgadzają się, nawet jakościowo, z symulacjami zawartymi w pracy JAP, rys. 3. Co może być tego przyczyną? Niestety do pracy doktorskiej nie załączono materiałów dodatkowych związanych z tą publikacją.

Kolejny rozdział zawiera pracę opublikowaną w Phys. Rev. B w roku 2023. W pracy przedstawiono obszerne badania anomalnego efektu Halla i anomalnego efektu Nernsta w CaAlSi. Praca ta jest przygotowana we współpracy z grupą doświadczalną, łącząc symulacje numeryczne z pierwszych zasad z eksperymentem, co pozwala na głębsze zrozumienie zachodzących zjawisk jak i wyjaśnienie efektów obserwowanych w laboratorium. Udział kandydatki w przygotowaniu tej publikacji jest znacznie większy niż poprzedniej, gdyż wyniki DFT, struktur pasmowych i przewodności Halla stanowią jej istotną część. Tym bardziej, iż z oświadczenia wynika, że kandydatka poza obliczeniami numerycznymi i przygotowaniem rysunków brała udział również w analizie wyników i przygotowaniu samego manuskryptu.

Niestety, do pracy doktorskiej nie zostały załączone materiały uzupełniające, gdzie również są zawarte wyniki badań kandydatki.

Rozdział 6 zawiera publikację, która ukazała się w Phys. Rev. B w roku 2023 i jest to druga praca w której kandydatka jest pierwszym autorem. W pracy przedstawione są wyniki badań numerycznych elektronowej struktury pasmowej w CrAs, który jest przykładem materiału zaliczającego się do nowej klasy materiałów magnetycznych, tzw. altermagnetyków. Jest to w mojej ocenie najważniejsza praca w dorobku kandydatki, zarówno ze względu na poruszaną tematykę, otrzymane wyniki, jakość pracy jak i znaczący udział kandydatki w jej przygotowaniu. Tak jak znaczący udział kandydatki w jej przygotowaniu nie ulega wątpliwości, to są nieścisłości w jej oświadczeniu, że przygotowała wszystkie rysunki, poza Fig. 8, to z oświadczeń współautorów wynika, że również Fig. 1 nie był jej autorstwa. Odnośnie tej pracy mam tylko kilka uwag o wyjaśnienie niektórych stwierdzeń zawartych w publikacji:

- „We focus on the semi-Dirac points at the R point, but they are present at all borders of the Brillouin zone.” Czy zostało to sprawdzone, czy występowanie „semi-Dirac points” wzdłuż całej granicy strefy Brillouina wynika z ogólnych właściwości struktury pasmowej?
- „Therefore, the bands with opposite glide eigenvalues are orthogonal and do not hybridize each other [16,46,47]; this is exactly true for the bands with linear dispersion very close to the border of the Brillouin zone, while away from the Brillouin zone border the bands tend to show mixing of the eigenvectors.” Dlaczego w środku strefy Brillouina występuje mieszanie wektorów własnych i na ile jest to ogólne stwierdzenie?
- Argumentacja prowadząca do stwierdzenia „Therefore, we can claim that the interplay between AM and nonsymmorphic symmetries generates large anomalous Hall conductivity.”, co wydaje się być jednym z głównym wniosków pracy, nie jest dla mnie jasna.

Kolejny rozdział, krótko streszcza perspektywy badawcze i zastosowania omawianych w pracy doktorskiej materiałów i właściwości. Jest to dość ogólny tekst i trochę brakuje bezpośrednich odniesień (poza nielicznymi wyjątkami) do konkretnych wyników autorki, które mogą czy też już przyczyniły się do rozwoju.

Po oświadczeniach jest bibliografia, z literaturą wykorzystaną w rozdziałach wstępnych i perspektywach. Jest to dość bogata literatura przedmiotu, dobrze dobrana i aktualna. Natomiast brakuje staranności w jej przygotowaniu, np. brakuje wielkich liter przy nazwiskach czy symbolach pierwiastków występujących w tytułach, nazw wydawnictw, brak konsekwencji w pisowni nazw czasopism, danych bibliometrycznych czy pisowni imion autorów.

Podsumowując, stwierdzam, że pani mgr Amar Fakhredine przedłożył pracę doktorską, zawierającą oryginalne wyniki badawcze związane z obliczeniami z pierwszych zasad dotyczących kilku materiałów magnetycznych o interesujących właściwościach. Dokonała ciekawej analizy niektórych z otrzymanych wyników numerycznych. Tym samym spełniła główną przesłankę stawianą przez ustawę, iż rozprawa doktorska stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego.

Doktorantka zademonstrowała dobry poziom znajomości jeśli chodzi o stosowaną metodę obliczeniową, gorzej jeśli chodzi o szerszą wiedzę z zakresu fizyki ciała stałego. Na pozytywną ocenę zasługuje podjęcie współpracy z grupami eksperymentalnymi. W mojej ocenie jest to bardzo ważne i podnoszące wartość badań, a także pokazujące zdolność kandydatki do współpracy. Pozwala mi to uznać, że rozprawa spełnia w stopniu dostatecznym drugą przesłankę ustawową, czyli że rozprawa doktorska prezentuje ogólną wiedzę teoretyczną osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora w dyscyplinie nauki fizyczne.

Sama praca doktorska jak i jedna z publikacji nie zostały przygotowane z należytą starannością. Nie mniej, biorąc pod uwagę pozostałe trzy publikacje, z których dwie są z dużym wkładem kandydatki i przygotowane w bardzo dobrym standardzie, stwierdzam, że rozprawa doktorska wykazała umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej przez mgr Amar Fakhredine.

Tym samym, zgodnie z art. 187 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2018 r. poz. 1668 z późn. zm.) stwierdzam, że przedłożona rozprawa doktorska mgr Amar Fakhredine spełnia wymagania do uzyskania stopnia doktora w dyscyplinie nauki fizyczne.

Maciej Krawczyk



Prof. dr hab. Maciej Krawczyk
Instytut Spintroniki i Informatyki Kwantowej
Wydział Fizyki
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 2
61-614 Poznań
Email: krawczyk@amu.edu.pl