



Prof. dr hab. Mariusz Krawiec
Katedra Fizyki Powierzchni i Nanostruktur
Instytut Fizyki
Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej
pl. M. Curie-Skłodowskiej 1
20-031 Lublin

Lublin, 14 grudnia 2022 r.

**Recenzja rozprawy doktorskiej pana mgr. inż. Macieja J. Szarego
pt. „Struktura elektronowa i spinowa wybranych układów dwuwymiarowych
– badanie DFT”**

Przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska pana mgr. inż. Macieja J. Szarego została wykonana na Wydziale Inżynierii Materiałowej i Fizyki Technicznej Politechniki Poznańskiej pod kierunkiem dr. hab. Arkadiusza Ptaka, prof. PP. Promotorem pomocniczym był dr Marek T. Michalewicz zatrudniony w Interdyscyplinarnym Centrum Modelowania Matematycznego i Komputerowego Uniwersytetu Warszawskiego.

Rozprawa liczy 112 stron, z czego 46 stron to reprints siedmiu publikacji naukowych P1–P7 stanowiących podstawę ubiegania się p. Szarego o stopień doktora. Wszystkie te prace zostały opublikowane w latach 2016-2019 w bardzo dobrych czasopismach naukowych o zasięgu międzynarodowym: Physical Review B (2 prace), Applied Surface Science (3 prace), Surface Science (1 praca) i FlatChem (1 praca). Trzy prace (P3, P4 i P7) są jednoautorskie, a pozostałe – wieloautorskie i zawierają od trzech do czterech autorów. W trzech z czterech prac wieloautorskich nazwisko p. Szarego figuruje na pierwszym miejscu listy autorów nieułożonej w kolejności alfabetycznej, co wskazuje na istotny wkład doktoranta w ich przygotowanie. Jego wiodący udział w poszczególnych pracach został także potwierdzony w stosownych oświadczeniach współautorów artykułów zamieszczonych na końcu rozprawy. W tym miejscu warto podkreślić, że samodzielne publikacje na tym etapie kariery naukowej nie są czymś często spotykanym.

Zestaw publikacji został w rozprawie poprzedzony kilkustronicowym wstępem, zwięzłą prezentacją badanych układów i ich opisem teoretycznym, krótkim omówieniem wyników obliczeń zawartych w wymienionych publikacjach, podsumowaniem oraz prezentacją dorobku naukowego i działalności akademickiej. Całość kończą oświadczenia współautorów prac oraz bibliografia zawierająca 82 pozycje. Struktura pracy jest przejrzysta z logicznym podziałem na rozdziały i podrozdziały, co znacznie ułatwia lekturę dysertacji. Sposób doboru źródeł dowodzi należytej staranności właściwej dla prowadzenia badań naukowych. Niestety ogólnie pozytywne wrażenie psuje strona redakcyjna dysertacji, o której nie da się powiedzieć dużo dobrego. Pomijając drobne niedociągnięcia jak np. „właściwością” zamiast „właściwościami” na stronie 24, czy używanie słowa „ilość” w stosunku do rzeczownika policzalnego „warstwa”, jest sporo niezgrabnych sformułowań, skrótów myślowych, czy tzw. spolszczeń wyrazów. Dla przykładu wymienię tylko na stronie 19 zwroty

„integracja strefy Brillouina”, „interakcji kulombowskiej”, czy „zoptymalizowane do zadanego kryterium sił”, na stronie 22 „kompozycją orbitali”, na stronie 24 „spróbkowana siatka”, „interfejs” w znaczeniu „międzywarstwa”, czy na stronie 27 „relaksacja struktur atomowych”. Zjawisko to jest o tyle poważne, że w niektórych przypadkach może wypaczyć sens sformułowań. Jednak najpoważniejszym błędem, zakładam, że redakcyjnym, jest przetłumaczenie z języka angielskiego słowa „germanene” na polskie „germacen” i jego nagminne używanie w rozprawie. Naturalnym i poprawnym tłumaczeniem na język polski jest słowo „germanen”, które podobnie jak „grafen”, „silicen”, czy „stanen”, jest typowym spolszczeniem. Pewnie nie uwypuklałbym tego błędu aż tak mocno, gdyby nie fakt, że pod nazwą „germacen” kryje się zupełnie inny związek chemiczny, który należy do rodziny węglowodorów i nie ma nic wspólnego z materiałem dwuwymiarowym w postaci pojedynczej warstwy atomów germanu. Na koniec omówienia strony redakcyjnej jeszcze uwaga dotycząca skrótów i oznaczeń wykorzystywanych w rozprawie. Autor zamieścił spis takich akronimów, co uważam za pomocne w lekturze pracy, ale decydując się na to nie ma już potrzeby ponownego ich wprowadzania we właściwym tekście. Tym bardziej, że np. skrótowiec „DFT” został wprowadzony aż trzykrotnie. Zakładam, że powyższe uchybienia wynikają wyłącznie z pośpiechu w przygotowywaniu rozprawy, bo doktorant potrafi pisać porządne artykuły naukowe, czemu dawał już wyraz w jego publikacjach jednoautorskich.

Problematyka rozprawy dotyczy układów o zredukowanej wymiarowości. Jedną grupę takich układów stanowią epitaksjalne struktury dwuwymiarowe (2D) wytworzone na powierzchniach półprzewodników, a drugą struktury hybrydowe oparte na materiałach 2D. Jest oczywiste, że ogromny postęp technologiczny, którego jesteśmy świadkami w ostatnim czasie nie byłby możliwy, gdyby nie półprzewodniki i towarzysząca miniaturyzacja urządzeń na nich opartych. W tym kontekście krzem jest materiałem półprzewodnikowym, który wiezie prym w obecnej elektronice. Jest to wynik jego dużej dostępności oraz doskonale opanowanej technologii masowej produkcji kryształów Si. Jednak ograniczenia wynikające z natury tego materiału są odpowiedzialne za systematyczne spowalnianie tego postępu i coraz intensywniej poszukuje się alternatywnych rozwiązań. Jednym z potencjalnie obiecujących idei jest wykorzystanie spinowych stopni swobody i ewolucja w stronę układów spintronicznych. Powinno to zaowocować wyższą wydajnością urządzeń z równoczesnym zmniejszeniem poboru energii. Jednak głównym wyzwaniem jest uzyskanie i transport spinowo spolaryzowanych elektronów w temperaturze pokojowej. W przypadku epitaksjalnych struktur 2D wymaga to dość dużego rozszczepienia spinowego metalicznych pasm na powierzchni półprzewodnika. Dlatego intensywnie eksploruje się epitaksjalne struktury 2D utworzone z metalicznych warstw pierwiastków ciężkich na podłożach półprzewodnikowych, gdzie do głosu dochodzi silne oddziaływanie spin-orbita (SO). Innym potencjalnym kierunkiem pokonania problemów technologii krzemowej jest wykorzystanie materiałów 2D. Niewątpliwie układy hybrydowe oparte na grafenie, silicenie, germanenie, czy dichalkogenkach metali przejściowych (TMD) stanowią atrakcyjną alternatywę. Pierwsze elementy elektroniczne, jak chociażby tranzystory polowe, oparte na takich materiałach są obecnie projektowane, syntezowane i charakteryzowane. Pod tym względem problematyka rozprawy jest bardzo aktualna i doskonale wpisuje się w główny nurt badań intensywnie prowadzonych na całym świecie.

Praca poświęcona jest badaniom teoretycznym powierzchniowych struktur 2D: Pb/Si(111) i Pb/Ge(111) oraz układów hybrydowych: Pb/germanen, Pb/MoTe₂, Ge(111)/MoTe₂ i silicen/MoTe₂. Badania te można także podzielić na dwie grupy, z których jedna koncentruje się wokół adsorbatu, którym jest ołów, a druga na chemicznym funkcjonalizowaniu MoTe₂. Można też spojrzeć na to jako na płynne przejście od heterostruktur z silnymi wiązaniami chemicznymi i towarzyszącymi im zagadnieniami spintronicznymi do układów hybrydowych typu van der Waalsa i straintroniki. W rozprawie dyskutowano właściwości strukturalne, energetyczne i elektronowe badanych układów

obliczone z pierwszych zasad z wykorzystaniem teorii funkcjonału gęstości (DFT). W szczególności obliczono energie oddziaływań, wyznaczono elektronowe struktury pasmowe i dokonano ich analiz orbitalnych. Przeprowadzone obliczenia pozwoliły na określenie typów oddziaływań pomiędzy podukładami oraz ich wpływu na właściwości układu, głównie w kontekście zniesienia degeneracji spinowej. W przypadku struktur funkcjonalizowanych atomami Pb wyjaśniono mechanizm rozszczepienia spinowego metalicznych pasm elektronowych. Okazało się, że w tym kontekście ogromną rolę odgrywa charakter orbitalny pasm energetycznych. W drugiej części prac skupiono się na modyfikowaniu właściwości elektronowych warstwy MoTe_2 poprzez jej funkcjonalizowanie bądź to adsorbatem, bądź podłożem. Kluczowe tutaj okazały się naprężenia rozciągające, które mogą zostać wykorzystane do sterowania zarówno właściwościami elektronowymi jak i aktywnością chemiczną MoTe_2 .

Rozdział pierwszy, zatytułowany „Forma rozprawy doktorskiej”, zawiera szczegółowe dane bibliograficzne siedmiu artykułów naukowych p. Szarego składających się na rozprawę doktorską. Zgodnie z wymogami przepisów Ustawy publikacje wchodzące w zakres rozprawy doktorskiej stanowią zbiór spójny tematycznie. Cykl artykułów poświęcony jest modyfikacjom właściwości strukturalnych, elektronowych i spinowych wybranych struktur powierzchniowych oraz materiałów dwuwymiarowych. Do każdej publikacji cyklu w formie opisowej został podany precyzyjny wkład doktoranta, z którego wynika, że jego udział w powstawaniu tych prac był znaczący. Deklaracje doktoranta są spójne z oświadczeniami pozostałych autorów prac. Warto także przypomnieć, że trzy prace są samodzielnymi dziełami p. Szarego, co oznacza, że oprócz standardowych czynności charakterystycznych dla procesu powstawania publikacji, jest on także pomysłodawcą badań.

Motywacji podjętych badań został poświęcony rozdział drugi, w którym można znaleźć jej uzasadnienie poparte odnośnikami do literatury. W dalszej części tego rozdziału zdefiniowano cele pracy, do których zaliczono: (i) zbadanie mechanizmu odpowiedzialnego za rozszczepienie spinowe wywołane adsorpcją ołowiu na powierzchni wybranych materiałów, (ii) określenie relacji między obserwowanym rozszczepieniem spinowym a oddziaływaniami mającymi miejsce na powierzchni układu, (iii) zbadanie roli oddziaływań van der Waalsa w kontekście łamania symetrii inwersyjnej w heterostrukturach materiałów 2D, (iv) zbadanie stabilności faz Pb na powierzchni germanenu oraz wpływu Pn na strukturę pasmową warstwy, (v) zbadanie wpływu naprężenia rozciągającego na aktywność chemiczną warstwy MoTe_2 oraz (vi) zbadanie wpływu naprężenia rozciągającego na właściwości elektronowe heterostruktury silicenu/ MoTe_2 . Cele zostały sformułowane jasno, precyzyjnie i szczegółowo. Można jednak odnieść wrażenie, że cele te dotyczą poszczególnych publikacji, a nie samej rozprawy doktorskiej.

W rozdziale trzecim przedstawiono podstawowe informacje dotyczące wykorzystywanej w pracy metody obliczeniowej, którą jest teoria funkcjonału gęstości. W zasadzie ograniczono się tylko do szczegółów technicznych, jak np. użyte przybliżenia dla funkcjonału korelacyjno-wymennego, czy podstawowe parametry obliczeń. Ta część rozprawy może budzić pewien niedosyt, a jeśliby wskazać jakieś uwagi, to można było pokusić się o krótkie wprowadzenie samej metody wraz z jej podstawowymi założeniami i ewentualnymi ograniczeniami.

Rozdział czwarty to omówienie wyników obliczeń zawartych w pracach P.1-P.7. Wszystkie publikacje zostały krótko przedyskutowane, a wnioski płynące z rozważań jasno wyartykułowane. Opis ten jest dość oszczędny i w głównej mierze służy uporządkowaniu uzyskanych wyników i wniosków, a po pełniejszą analizę i dyskusję trzeba sięgać do oryginalnych prac. Jednak nie traktowałbym tego jako wadę, ale raczej jako zaletę, jako zachętę do lektury właściwych artykułów.

W rozdziale piątym zawarto podsumowanie badań wraz ze wskazaniem najbardziej istotnych wyników i wniosków. Sposób ich prezentacji dowodzi głębokiego zrozumienia przez doktoranta poruszanych zagadnień. Jeśliby jednak doszukiwać się jakichś mankamentów tej części rozprawy, to niewątpliwie brak jakiegokolwiek wzmianki o perspektywach i kierunkach dalszych badań.

Dość nietypowe, jak na rozprawę doktorską, treści zawierają rozdziały szósty i siódmy. Można w nich znaleźć wykaz publikacji, wystąpień konferencyjnych, odbytych stażów i praktyk, sporządzonych recenzji publikacji oraz krótkie omówienie działalności dydaktycznej. Ta część dysertacji formą przypomina bardziej rozprawę habilitacyjną niż doktorską. Niemniej jednak informacje przedstawione w tych dwóch rozdziałach są bardzo cenne, ponieważ pokazują pełniejszą sylwetkę naukową doktoranta. W przypadku pana Szarego niewątpliwie mamy do czynienia z osobą mocno zaangażowaną w badania naukowe i działalność akademicką, czego wymownym rezultatem chociażby niech będzie liczba publikacji.

Ostatni, ósmy rozdział zawiera przedruki artykułów naukowych składających się na cykl publikacji stanowiących podstawę ubiegania się pana mgr. Szarego o stopień doktora, które teraz omówię.

Publikacja P.1 poświęcona jest analizie struktury elektronowej powierzchni Si(111) pokrytej adatomami Pb. Wydawałoby się, że układ Pb/Si(111) jest już tak przebadany teoretycznie, że nie warto się nim zajmować, ale autorom udało się znaleźć jeszcze coś interesującego, a zarazem coś, co można uogólnić na inne podobne struktury. Chodzi o rozszczepienie spinowe pasm powierzchniowych i ich zależności od charakteru wiązań chemicznych w kontekście łamania symetrii rozkładu gęstości elektronowej. Rozważano różne miejsca adsorpcyjne atomów Pb: T_1 , T_4 i H_3 . Energetycznie najbardziej korzystna jest konfiguracja T_1 , jednak charakteryzuje się ona niemal całkowitym wygaszeniem rozszczepienia SO pasm metalicznych. Wynik ten wydaje się być w zgodzie z dostępnymi danymi eksperymentalnymi dla struktur i cienkich warstw Pb na powierzchni Si(111) uzyskanymi przy pomocy spektroskopii fotoemisyjnej z rozdzielczością kątową i spinową. Szkoda, że wątek ten nie został podjęty. Pozostałe dwie konfiguracje strukturalne charakteryzują się znacznym rozszczepieniem pasm energetycznych. Efekt ten związany jest z łamaniem symetrii rozkładu ładunku, co jest źródłem pola elektrycznego, które w układzie poruszających się elektronów działa jak efektywne pole magnetyczne.

Praca P.2 to kontynuacja tematyki podjętej w publikacji P.1 przeniesionej na inne podłoże, którym jest Ge(111). W zasadzie rezultaty badań teoretycznych są bardzo podobne do przypadku atomów Pb na powierzchni Si(111). W szczególności adsorpcja Pb wygląda podobnie, zarówno pod względem geometrycznym jak i energetycznym, co przekłada się także na podobieństwa w strukturze elektronowej, również pod względem rozszczepienia pasm energetycznych. Pewnie artykuł miałby dużo mniejszą wartość, gdyby nie próba analizy struktury elektronowej w oparciu o niedawno zaproponowany orbitalny model Rashby. W tym podejściu rozszczepienie spinowe pasm jest sumą efektów wywołanych atomowym sprzężeniem SO oraz oddziaływaniem pomiędzy asymetrycznie rozłożonym ładunkiem i powierzchniowym polem elektrostatycznym. Ten ostatni wkład jest efektem nierelatywistycznym. Warto zauważyć, że dopiero uwzględnienie obydwu efektów w pełni wyjaśnia wielkość rozszczepienia spinowego pasm w różnych strukturach. W przypadku Pb/Ge(111) rozszczepienie pasm wokół punktu K strefy Brillouina prawie całkowicie generowane jest przez atomowe oddziaływanie SO adatomów Pb. Przeprowadzona analiza w znacznym stopniu wzbogaca opis fizyczny struktur Pb na powierzchniach półprzewodników, a także naszą wiedzę o mechanizmach rozszczepienia spinowego widm elektronowych.

Zagadnienie rozszczepienia pasm metalicznych w strukturach Pb na powierzchni Ge(111) było

kontynuowane w pracy P.3. O ile poprzednie dwie prace traktowały przede wszystkim o strukturze pasmowej wokół punktu K strefy Brillouina, gdzie polaryzacja spinowa ma głównie kierunek prostopadły, o tyle w przypadku publikacji P.3 skupiono się na punkcie M strefy, gdzie kierunek polaryzacji spinowej leży w płaszczyźnie. Oczywiście różnice te wynikają z niezmienniczości lub jej braku danego punktu k względem transformacji odwrócenia czasu. Okazuje się, że w strukturze elektronowej wokół punktu M obserwuje się rozszczepienie pasm we wszystkich rozważanych konfiguracjach atomowych, a jej wartość jest ściśle skorelowana z charakterem orbitalnym danego pasma energetycznego.

Przedmiotem badań zawartych w artykule P.4 jest materiał 2D – germanen funkcjonalizowany chemicznie adatomami Pb. W pracy analizowano stabilność różnych faz ołowiu, wzorowanych na strukturach Pb/Ge(111) znalezionych w pracy P.2. Sporządzono diagram fazowy stabilności struktur Pb/germanen oraz przeprowadzono obliczenia widm fononowych. Jedyne fazy 1×1 okazały się strukturą stabilną. Jest ona podobna do struktury 1×1 atomów Pb na powierzchni Ge(111), ale z innymi miejscami adsorpcyjnymi Pb. Różnica ta została przypisana różnej geometrii wiązań spowodowanej odmiennym przekrywaniem się orbitali p_z atomów Pb i Ge. Przeprowadzone obliczenia struktury elektronowej pokazują, że układ jest metalem o bardzo dużym, chociaż mniejszym niż w przypadku Pb/Ge(111), rozszczepieniu spinowym pasm energetycznych.

W pracy P.5 pokazano, że silne rozszczepienie spinowe metalicznych pasm w heterostrukturach materiałów 2D niekoniecznie musi być związane z asymetrią ładunku elektrycznego w obecności silnych wiązań chemicznych pomiędzy podukładami. Na przykładzie struktury Pb/MoTe₂, która należy do klasy układów typu van der Waalsa, dowiedziono, że oddziaływania dyspersyjne pomiędzy warstwami Pb i MoTe₂ są wystarczająco silne, aby złamać symetrię inwersyjną i doprowadzić do rozszczepienia pasm. Przeprowadzona analiza w ramach modelu orbitalnego Rashby jednoznacznie wskazuje, że za takim zachowaniem stoi atomowe oddziaływanie SO typu LS.

Ostatnie dwie prace P.6 i P.7, chociaż pewnie zaliczyłbym jeszcze do nich publikację P.5, dotyczą pojedynczej warstwy MoTe₂ w kontakcie z innymi strukturami 2D w obecności naprężeń. Pojedyncza warstwa MoTe₂ jest półprzewodnikiem z prostą przerwą energetyczną, a pod wpływem naprężenia rozciągającego wartość przerwy energetycznej maleje. W pracy P.6 warstwa MoTe₂ została naprężona tak, aby stała sieci dopasowała się do stałej Ge(111). Przy tak dużej wartości naprężenia, ok. 14%, przerwa energetyczna zamyka się i układ znajduje się w fazie metalicznej. Naprężenie skutkuje także zwiększoną aktywnością chemiczną warstwy MoTe₂, co przejawia się silniejszym wiązaniem adsorbentu. W przypadku adsorpcji atomów Ge energetycznie korzystne jest formowanie się warstw (111) germanu, co chyba raczej jest oczekiwanym rezultatem. Struktura atomowa na granicy podukładów nie ulega modyfikacji pod wpływem liczby warstw Ge(111). Niemniej jednak tworzą się nowe stany w widmie energetycznym, co dowodzi powstawaniu wiązań chemicznych. Dokładna analiza orbitalna struktury pasmowej pokazuje, że zaangażowane są tutaj orbitale p_z atomów Te i Ge. Jednocześnie modyfikowane są wiązania chemiczne w samej warstwie MoTe₂. Wnioski płynące z tych badań są ciekawe i obiecujące, szczególnie w kontekście zastosowań straintronicznych i szkoda, że autorzy publikacji P.6 ograniczyli się tylko do jednej wartości naprężenia. Zapewne stała sieci heterostruktury Ge/MoTe₂ będzie się zmieniać wraz z liczbą warstw Ge(111), a wtedy można by prześledzić ewolucję zarówno właściwości strukturalnych jak i elektronowych. Podobna sytuacja ma miejsce w przypadku publikacji P.7, gdzie strukturę silicen/MoTe₂ analizowano także dla jednej wartości stałej sieci. W tym przypadku naprężenie warstwy MoTe₂ wynosiło 6%. Na tak naprężonej strukturze silicen może utworzyć trzy różne konfiguracje atomowe charakteryzujące się różnym natężeniem oddziaływania z warstwą podłoża. Oddziaływanie może być słabe i ograniczać się tylko do sił van der Waalsa, albo silne z wiązaniami kowalencyjnymi i towarzyszącą im hybrydyzacją stanów

p_z - p_z atomów Si i Te oraz mniej korzystną energetycznie hybrydyzacją orbitali p_{xy} - p_z . Badanie te pokazują, że zwiększona aktywność chemiczna warstw MoTe_2 spowodowana naprężeniami oraz znacząca hybrydyzacja stanów elektronowych w kontakcie z adsorbatem może ułatwić transfer elektronów pomiędzy podukładami, co jest dość istotne w kontekście projektowania i budowy urządzeń nanoelektronicznych.

Podczas lektury rozprawy dodatkowo nasunęły mi się następujące trzy uwagi:

- Niewątpliwie różnice w strukturze pasmowej pomiędzy badanymi układami Pb/Ge(111) i Pb/germanen wynikają z różnic w ich strukturach atomowych. W sposób naturalny nasuwa się więc pytanie o uwzględnienie oddziaływania SO w procesie optymalizacji geometrii i ewentualny jego wpływ na miejsca adsorpcyjne Pb. Jak pokazują doniesienia literaturowe [np. Phys. Rev. B 94, 075436 (2016)], czy nawet praca P.2, może to mieć dość istotny wpływ na wyniki obliczeń dla tego rodzaju materiałów. W zasadzie to pytanie może dotyczyć także publikacji P.1.
- Wszystkie obliczenia DFT zostały przeprowadzone dla geometrii charakterystycznej dla jednego z podukładów. Mowa tutaj o stałej sieci. O ile w przypadku modelowania powierzchni kryształu, np. Ge(111), jest to logiczne i w pełni uzasadnione, o tyle dla układów hybrydowych składających się z materiałów 2D już niekoniecznie. Nawet w przypadku struktury Pb/germanen adsorpcja atomów Pb z pewnością wpłynie na zmianę parametrów strukturalnych pojedynczej warstwy atomów Ge. Stała sieci układu Pb/ MoTe_2 pewnie także będzie mieć inną wartość, ponieważ stała sieci pojedynczej warstwy Pb jest o ok. 4% mniejsza niż wartość charakterystyczna dla kryształu Pb. Mamy więc naprężoną warstwę Pb. Oczekuję podobnego zachowania w przypadku pojedynczej i kilku warstw Ge(111) oraz silicenu na MoTe_2 . Stała sieci struktury hybrydowej powinna mieć wartość z przedziału stałych sieci charakterystycznych dla danych podukładów. Takie zmiany geometrii danego układu z pewnością nie pozostaną bez wpływu na właściwości elektronowe. Rozumiem, że intencją autora w jakimś stopniu była chęć wprowadzenia naprężeń do jednego z podukładów, ale mam poważne obawy, czy rzeczywiste obiekty będą zachowywać się tak, jak to zaprezentowano w publikacjach. Oczywiście modelować możemy różne rzeczy i zjawiska, ale zawsze powinniśmy starać się utrzymywać kontakt z eksperymentem. Nie neguję wyników otrzymanych przez doktoranta, bo moim zdaniem są ważne i interesujące, ale dobrze byłoby mieć pewność, że przynajmniej jakościowo będą opisywać właściwości rzeczywistych materiałów.
- W obliczeniach wykorzystywane były różne przybliżenia dla funkcjonału korelacyjno-wymiennego. Na przykład w pracy P2 i P3 ten sam układ opisywany był raz przybliżeniem LDA-PZ, a innym razem GGA-PBE. W pozostałych pracach korzystano jeszcze z innych przybliżeń. Pojawia się zatem pytanie o sens takiego postępowania. Dlaczego stosowano tak dużo różnych przybliżeń dla funkcjonału korelacyjno-wymiennego? Czy któreś z nich ma przewagę i daje bardziej wiarygodne wyniki dla danego układu?

W podsumowaniu należy stwierdzić, że tematyka podjęta w rozprawie pana magistra inżyniera Macieja Szarego jest ważna i aktualna, a uzyskane rezultaty stanowią cenne uzupełnienie wiedzy o materiałach i heterostrukturach 2D z punktu widzenia właściwości spintronicznych i straintronicznych. Chciałbym również podkreślić spójny charakter przeprowadzonych badań zarówno pod względem tematyki jak i użytych narzędzi teoretycznych. Za osiągnięcie doktoranta należy uznać przeprowadzenie szczegółowej analizy właściwości strukturalnych, energetycznych i elektronowych

epitaksjalnych struktur dwuwymiarowych wytworzonych na powierzchniach półprzewodników oraz struktur hybrydowych opartych na materiałach dwuwymiarowych. Nie byłoby to możliwe, gdyby nie wiedza i doświadczenie doktoranta w prowadzeniu obliczeń z pierwszych zasad.

Nie mam najmniejszych wątpliwości, że wyniki uzyskane w trakcie realizacji doktoratu istotnie poszerzają naszą wiedzę o naturze i właściwościach układów hybrydowych na bazie struktur dwuwymiarowych. Recenzowana rozprawa spełnia wszystkie zwyczajowe i ustawowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim i z pełnym przekonaniem wnoszę o dopuszczenie pana magistra inżyniera Macieja Szarego do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Mojej oceny nie zmieniają niedociągnięcia wyszczególnione w recenzji. Ponadto, zakres przeprowadzonych badań wraz z interpretacją uzyskanych wyników, a także okazały dorobek publikacyjny doktoranta zasługują na uznanie i sędzę, że rozprawa ta powinna zostać wyróżniona.



Mariusz Krawiec

