

dr hab. Karol Szałowski, prof. UŁ
Katedra Fizyki Ciała Stałego
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Uniwersytet Łódzki

Łódź, dn. 23.01.2025 r.

**Recenzja rozprawy doktorskiej Pani mgr Amar Fakhredine
p.t. *Interplay between non-relativistic spin-splitting and spin-orbit coupling
in metallic systems***

Przedstawiona rozprawa doktorska powstała w Zespole Heterostruktur Magnetycznych Oddziału Fizyki Magnetyzmu w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie (Doktorantka była słuchaczką Warszawskiej Szkoły Doktorskiej Nauk Ścisłych i Biomedycznych). 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 nauce¹.

Przedłożoną rozprawę tworzą 4 artykuły współautorskie opublikowane w okresie 2023–2025 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). Jedna z prac ukazała się w czasopiśmie *Applied Surface Science* (o wysokim Impact Factorze, równym 6,3 za rok 2023, plasującym się w pierwszym kwartylu w zakresie fizyki fazy skondensowanej, zawartym w wykazie Scopus TOP 10) – periodyku o uznanej renomie w zakresie fizyki powierzchni. Dwie kolejne Doktorantka opublikowała w *Physical Review B* (o Impact Factorze równym 3,2), cieszącym się ugruntowaną, wysoką renomą w społeczności fizyków fazy skondensowanej. Ostatnia z publikacji ukazała się w *Journal of Applied Physics* (Impact Factor równy 2,7), dobrze rozpoznawalnym i cenionym periodyku w obszarze fizyki stosowanej, silnie skoncentrowanym na fizyce ciała stałego. Łączna liczba autorów prac

¹ t.j. Dz. U. z 2024 r., poz. 1571.

zawiera się pomiędzy 3 a 12 (we wszystkich spośród nich współautorem jest promotor, a w 2 także promotor pomocniczy). W 2 pracach Doktorantka jest pierwszym autorem, w 2 pozostałych Jej nazwisko wymienione jest na drugim miejscu, w jednej z prac jest autorem korespondującym. Należy ocenić, że dokonany wybór czasopism dobrze służy upowszechnianiu uzyskanych wyników w społeczności fizyków fazy skondensowanej, jest trafny i właściwy z punktu widzenia podjętej tematyki, a renoma czasopism koresponduje z jakością uzyskanych wyników.

Wszystkie badane przez Doktorantkę układy charakteryzuje złamanie symetrii względem odbicia w czasie indukujące nierelatywistyczne rozszczepienie spinowe pasm energetycznych, a obecność w tych materiałach oddziaływania spin-orbita powoduje generowanie dodatkowych efektów – takich jak oddziaływanie Działoszyńskiego-Moriya (DM) oraz anomalne zjawisko Halla – co stanowi myśl przewodnią przedłożonej rozprawy. Trzy spośród 4 publikacji obejmują zagadnienia związane z materiałami wykazującymi ferromagnetyzm. Pierwsze dwie z nich koncentrują się na obliczeniach dotyczących oddziaływania DM w układach wielowarstw ferromagnetycznych, podczas gdy trzecia z publikacji dotyczących układów ferromagnetycznych odnosi się do anomalnego zjawiska Halla w półmetalu Weyla. Czwarta publikacja podejmuje natomiast tematykę altermagnetyzmu. Dwie ostatnie prace zawierają zatem wyniki dotyczące nowoczesnych materiałów topologicznych.

Cykl publikacji został przez Autorkę uzupełniony wartościowym wstępem, co tworzy spójną rozprawę doktorską. Zawiera on cenny materiał wprowadzający, wyjaśniający kluczowe pojęcia i zjawiska fizyczne oraz elementy używanej metodologii badawczej. Pierwszy rozdział wprowadzenia Doktorantka poświęciła fundamentalnym zjawiskom i pojęciom fizycznym powiązanim z tematyką rozprawy. Rozpoczyna go dyskusja zjawiska magnetyzmu, w tym podstawowych uporządkowań magnetycznych – wprowadzone zostaje tu pojęcie altermagnetyzmu i jego relacja do struktury pasmowej materiału i symetrii. Kolejno zaprezentowane zostaje też sprzężenie spin-orbita oraz oddziaływanie DM, a także anomalne zjawisko Halla, półmetale Weyla i fermiony pół-Diraca oraz symetrie niesymorficzne. Drugi z rozdziałów skoncentrowany jest na szczegółowej prezentacji formalizmu teoretycznego i obliczeniowego. Rozpoczyna go omówienie etapów prowadzących do metod opartych na teorii funkcjonalów gęstości (DFT), a więc ogólne zagadnienie wieloelektronowe, przybliżenie Borna-Oppenheimera, metoda Hartree-Focka, a wreszcie podwaliny DFT, jak twierdzenie Hohenberga-Kohna czy równania Kohna-Shama. Dalej autorka prezentuje kwestie związane z potencjałem korelacyjno-wymiennym, w tym przybliżenia LDA i GGA, oraz klasyfikuje używane w praktyce potencjały korelacyjno-wymienne. Kolejno dyskutowana jest baza fal płaskich, koncepcja pseudopotencjału oraz funkcje Wanniera i podejścia do ich konstrukcji. Tę część kończy prezentacja metody obliczania wielkości charakteryzujących anomalne zjawisko Halla.

Wprowadzenie oceniam jak wartościowe dla czytelnika, raczej dobrze wyważone co do stopnia szczegółowości i zarazem kompletności prezentacji formalizmu teoretycznego i aparatu

pojęciowego. Uzupełnia ono treść samych publikacji o elementy pominięte w nich, a nadające rozprawie spójności. Jest opatrzone dość bogatym wykazem literatury, liczącym 105 pozycji. Nasuwające się szczegółowe uwagi co do prezentacji formalizmu we wstępie wymieniam w dalszej części recenzji.

We wszystkich pracach Autorka używa pakietu Vienna ab initio simulation package (VASP), <https://vasp.at/>. Jest to dojrzałe oprogramowanie implementujące formalizm DFT, rozwijane od ponad 30 lat, z ponad 13 000 cytowań w samym 2023 r. – drugie najczęściej cytowane oprogramowanie takiego zastosowania (<https://atomistic.software/>). Oprogramowanie to korzysta z bazy fal płaskich i oferuje szeroki zakres funkcjonalności. Uważam, że opis cech tego pakietu powinien się dodatkowo znaleźć we wprowadzeniu do cyklu publikacji (VASP jest jedynie wspomniany bez dodatkowych wyjaśnień na s. 21 w kontekście pseudopotencjałów). Dokonany wybór narzędzia obliczeniowego należy uznać za zdecydowanie odpowiedni do postawionego celu badawczego.

Publikacje Doktorantki składające się na rozprawę tworzą osobne 4 rozdziały, poprzedzone zresztą skonstruowanymi wstępami omawiającymi motywację i wyniki badań.

Pierwsza z prac Doktorantki, *Huge Dzyaloshinskii–Moriya interactions in Pt/Co/Re thin films*, opublikowana w *Journal of Applied Physics*, dotyczy badań oddziaływania DM w cienkich warstwach złożonych z metali przejściowych oraz metali ciężkich, mianowicie Pt/Co/Re. Motywację pracy stanowiły eksperymenty stwierdzające występowanie w heterostrukturach Pt/Co/W oddziaływania DM o znaczącej energii [heterostrukture w których skład wchodzi Pt i Co lokują się wśród układów wykazujących najwyższe energie tego oddziaływania, por. np. R. E. Camley i K. L. Livesey, *Surface Science Reports* 78 (2023) 100605; DOI:10.1016/j.surfrep.2023.100605, M. Kuepferling i in., *Review of Modern Physics* 95 (2023) 015003; DOI:10.1103/RevModPhys.95.015003 czy R. A. Gallardo i in., *Spin waves in thin films and magnonic crystals with Dzyaloshinskii–Moriya interactions*, w: *Three-Dimensional Magnonics. Layered, Micro- and Nanostructures* (red. G. Gubbiotti), Jenny Stanford Publishing, 2019; DOI:10.48550/arXiv.1903.04288]. Istotną cechą przeprowadzonych w pracy obliczeń jest wzięcie pod uwagę zarówno idealnych, jak i niedoskonałych granic warstw, z uwzględnieniem mieszania się atomów. Badane warstwy składały się z 5 warstw atomowych metalu ciężkiego i 1–10 warstw Co pomiędzy nimi. Modele mieszania się atomów na granicy warstw obejmowały lokalne tworzenie stopu zawierającego 50% atomów jednego i 50% atomów drugiego pierwiastka w dwóch sąsiadujących warstwach (na dwa sposoby, różniące się wyborem drugich sąsiadów, przy identycznym wyborze najbliższych sąsiadów). Parametry oddziaływania DM wyznaczone były przez porównanie energii stanu o przeciwnych chiralnościach, za pracą H. Yang i in., *Physical Review Letters* 115 (2015) 267210; DOI:10.1103/PhysRevLett.115.267210. Obliczenia takie dotyczyły zarówno wartości globalnych, dla całej warstwy, jak i określonych z rozdzielczością co do numeru płaszczyzny atomowej. Podawane wartości dotyczyły samej energii oddziaływania DM (parametru w hamiltonianie spinowym) oraz powierzchniowej gęstości energii.

Dla doskonałej powierzchni rozdziału warstw stwierdzono, że energia oddziaływania DM zasadniczo spada wraz ze wzrostem grubości warstwy Co w przybliżeniu odwrotnie proporcjonalnie do liczby monowarstw Co, osiągając maksimum dla 2 warstw i wykazując pewne oscylacje przypisane metaliczności układu; maksymalna wartość sięga około 9 mJ/m^2 , przy najwyższych wartościach osiąganych dla Pt/Co/W rzędu 2 mJ/m^2 . Obliczenia z rozdzielczością przestrzenną wskazały, że znak oddziaływania DM przejawia oscylacje w funkcji położenia warstwy Co, a największe wartości energii są osiągane dla obu warstw skrajnych (co stanowi mechanizm maksymalizacji energii oddziaływania DM, ze względu na ten sam znak wartości dla obu warstw skrajnych oraz addytywność tych energii). Zauważam, że na rysunku 4 w opisie osi pionowej powinno być raczej d^k a nie d^{tot} . Przedmiotem badań Autorki stał się również profil namagnesowania w całej trójwarstwie. Wskazuje on, oprócz dominującego namagnesowania warstwy Co, na pojawianie się momentów magnetycznych na atomach Pt (z wartością momentu spadającą wraz z oddalaniem się od interfejsu) przy braku takiego znaczącego efektu dla Re i z lekkim obniżeniem momentu na atomach Co sąsiadujących z warstwą Re. Dość podobny jakościowy charakter wykazują wyniki obliczone zarówno dla doskonałych powierzchni rozdziału, jak i dla modelowych przypadków mieszania na granicy. Co ciekawe, mieszanie atomów na granicy Co/Pt podwyższa moment magnetyczny na obu rodzajach atomów w stosunku do idealnego interfejsu, natomiast mieszanie na granicy Co/Re znacząco obniża moment na atomach Co (i to nawet w 2 warstwach sąsiadujących z interfejsem, co prowadzi do znaczącego odstępstwa od jednorodnego profilu namagnesowania). Warto dostrzec, że kierunek słabych momentów magnetycznych indukowanych na atomach Re jest przeciwny niż dla Co. Autorka przebadła również wpływ mieszania atomów na granicy warstw na oddziaływanie DM: tutaj największe znaczenie ma mieszanie na granicy Co/Pt, powodujące znaczący spadek energii oddziaływania DM, natomiast wpływ niedoskonałości granicy Co/Re jest raczej ograniczony. Zaprezentowane przez Doktorantkę wyniki wykazują bardzo istotny wpływ niedoskonałości interfejsu na właściwości magnetyczne, co ma istotne znaczenie dla urządzeń spintroniki i ich inżynierii, zwłaszcza dla realistycznego modelowania i projektowania.

W kontekście tej pracy chciałbym spytać o potencjalny wpływ naprężeń w badanych obliczeniowo strukturach na uzyskane wyniki. Jak pisze Autorka, „For modeling the geometries of the interfaces, the experimental in-plane lattice constant of the Pt (111) surface, which is $3.92 \text{ \AA}$ was used and hcp layer growth was assumed for Co and Re layers, while for Pt, fcc growth was considered”. Jakie są eksperymentalne stałe sieci dla Co i Re w fazach przyjętych na potrzeby konstrukcji modelu wielowarstwy? Czy można jakoś skomentować istotność naprężeń dla badanych zjawisk? [por. np. praca N. S. Gusev i in., *Physical Review Letters* 124 (2020) 157202; DOI:10.1103/PhysRevLett.124.157202]. Ponadto, czy można by porównać wyniki d^{tot} z sumą wartości d^k dla poszczególnych przypadków badanych wielowarstw?

Razem z pierwszą publikacją należy rozpatrywać kolejną z prac Doktorantki, *Evolution of static and dynamic magnetic properties of Re/Co/Pt and Pt/Co/Re trilayers with enhanced Dzyaloshinskii-Moriya interaction*, w *Applied Surface Science*, dotyczącą również heterostrukтуры

Re/Co/Pt (Doktorantka zajmuje tu drugie miejsce na liście autorów). W tej publikacji wyniki obliczeń DFT Autorki zostały wzbogacone o liczne rezultaty eksperymentalne. Są to przede wszystkim badania magnetometryczne wykonane metodą opartą na magnetoptycznym efekcie Kerra, prowadzące do interesujących rezultatów dotyczących energii anizotropii. Natomiast kluczowe z punktu widzenia tematyki rozprawy wyznaczenie energii oddziaływanie DM przeprowadzone zostało metodą spektroskopii Brillouinowskiej i uzupełnione o charakteryzację struktury metodą transmisyjnej mikroskopii elektronowej i odbiciowej wysokoenergetycznej dyfrakcji elektronowej oraz wyznaczanie składu chemicznego przez mikroanalizę rentgenowską. Badania te wykonano w ramach współpracy pomiędzy IF PAN w Warszawie oraz w Uniwersytecie w Białymstoku. Należy podkreślić, że chęć skonfrontowania wyników obliczeń teoretycznych z wynikami eksperymentalnymi i dążenie do symulowania układu jak najbardziej zbliżonego do eksperymentalnego stanowi bardzo wartościowe podejście badawcze i jest szczególnie godne pochwały.

Kluczowe wyniki Doktorantki w tej pracy dotyczyły ponownie obliczeń wartości energii oddziaływania DM. Należy zauważyć, że wyniki obliczeń DFT przeprowadzonych z uwzględnieniem mieszania atomów na interfejsie Co/Pt są zgodne z rezultatami pomiarów tej samej wielkości w oparciu o spektroskopię Brillouinowską; to samo porównanie wskazuje, że wartości otrzymywane dla idealnych granic rozdziału warstw są zauważalnie zawyżone. Otrzymane przez Doktorantkę wyniki wyjaśniają zatem obserwowany w eksperymencie efekt, podkreślając kluczową wagę uwzględniania niedoskonałości interfejsu dla ilościowego modelowania właściwości badanych warstw. Pomocnicze wyniki teoretyczne, zawarte w materiałach uzupełniających publikację, prezentują rozkład namagnesowania oraz zależność całkowitego momentu magnetycznego od grubości warstwy Co. Podobnie jak w poprzedniej publikacji, sugerują one, że mieszanie atomów na interfejsie Pt/Co podwyższa całkowite namagnesowanie i prowadzi do dość jednorodnego rozkładu namagnesowania, podczas gdy mieszanie na interfejsie Co/Re skutkuje obniżeniem namagnesowania i dość niejednorodnym jego rozkładem. Uważam, że w przedstawionej rozprawie powinny być zawarte również materiały uzupełniające (Supplementary material) towarzyszące publikacji, zwłaszcza że zawierają one wyniki obliczeń DFT.

W kontekście dyskutowanej publikacji nasuwa mi się pytanie otwarte, czy istniałyby możliwości eksperymentalnego zmierzenia rozkładów przestrzennych namagnesowania poszczególnych płaszczyzn atomowych w badanym układzie?

Miałbym również prośbę o komentarz dotyczący mieszania się atomów na interfejsie w świetle danych doświadczalnych zaprezentowanych w publikacji. Wydaje się, że mikroanaliza rentgenowska (rys. 1c) pokazuje dość rozmyte interfejsy, jeśli chodzi o skład chemiczny. Na ile zatem przyjęty w obliczeniach DFT model z uwzględnieniem zmiany kompozycji tylko 2 warstw jest realistyczny?

Trzecia publikacja Doktorantki, *Sign change of anomalous Hall effect and anomalous Nernst effect in the Weyl semimetal CeAlSi*, opublikowana w *Physical Review B*, dotyczy CeAlSi, należącego do klasy półmetali Weyla – istotnych materiałów topologicznych. Szczególną cechą CeAlSi jest występowanie uporządkowania ferromagnetycznego o charakterze niekolinearnym. Taka sytuacja daje możliwość kontroli położenia punktów Weyla przez przyłożenie zewnętrznego pola magnetycznego i przejście do innej fazy uporządkowanej magnetycznie. Publikacja ponownie łączy wyniki eksperymentalne i teoretyczne – rezultaty doświadczalne dotyczą pomiarów anomalnej przewodności Halla oraz współczynników charakteryzujących właściwości termoelektryczne (zjawisko Seebecka i Nernsta). Głównym celem prac teoretycznych jest tu modelowanie wspomnianych powyżej zjawisk.

Podobnie jak w przypadku publikacji 2, również w przypadku publikacji 3 Autorka niestety nie umieściła w rozprawie materiałów uzupełniających towarzyszących publikacji, a zawierają one np. szczegóły procedur obliczeniowych DFT, ważne uwagi o procedurze wannieryzacji czy też wyniki ilustrujące obliczenia anomalnych przewodności Halla i Nernsta.

W obliczeniach DFT Autorka rozważała 3 struktury magnetyczne w CeAlSi: 2 struktury kolinearne (z momentami magnetycznymi ułożonymi w kierunku osi a lub osi c) oraz strukturę niekolinearną (stanowiącą stan podstawowy). Tutaj wartościowa byłaby informacja o różnicy energii całkowitej pomiędzy strukturami kolinearnymi a stanem podstawowym. Mam również otwarte pytanie – czy przeprowadzone obliczenia umożliwiłyby oszacowanie pola magnetycznego potrzebnego do przelączenia pomiędzy stanem niekolinearnym a kolinearnym? Same momenty magnetyczne w CeAlSi pochodzą od orbitali f atomów Ce, o wysokim stopniu lokalizacji. W dyskusji wyników dotyczących struktury pasmowej przydatny byłby schemat pierwszej strefy Brillouina, określający położenia punktów wysokiej symetrii uwzględnionych na rys. 6 w publikacji. Dla 3 rozważanych struktur magnetycznych została wyznaczona struktura pasmowa, której szczegóły wykazują zależność od konfiguracji momentów magnetycznych. Ciekawe tutaj byłoby przedstawienie struktury pasmowej w jeszcze węższym zakresie energii wokół powierzchni Fermiego, w tym próba przedstawienia punktów Weyla w taki sposób, jak zrobiono to na rys. M6 w pracy H. Y. Yang i in, *Physical Review B* 103 (2021) 115143; [DOI:10.1103/PhysRevB.103.115143](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.115143) (Supplemental material). Nasuwa się tu pytanie - czy dałoby się zaznaczyć/przedstawić bliżej te punkty Weyla, które odpowiadają potem szczególnie za właściwości magnetotransportowe i porównać ich pozycję dla wszystkich 3 uporządkowań magnetycznych?

Dalsze obliczenia Doktorantki dotyczą modelowania anomalnej przewodności Halla. Pierwszy krok stanowiło zbudowanie hamiltonianu typu ciasnego wiązania w bazie maksymalnie zlokalizowanych funkcji Wanniera, przy wykorzystaniu interfejsu VASP2WANNIER90. W oparciu o ten hamiltonian określono krzywiznę Berry'ego i obliczono niskotemperaturową anomalną przewodność Halla (typu samoistnego), por. wyjaśnienia w rozdziale 1.5. Obliczona przewodność wykazuje różnicę znaków pomiędzy orientacją namagnesowania wzdłuż osi a (os łatwego

namagnesowania) i c (os trudnego namagnesowania), co pozostaje w zgodności z wynikami pomiarów. Obliczenia dotyczyły także modelowania anomalnej przewodności Halla i Nernsta w skończonych temperaturach (schemat ich związku z krzywizną Berry'ego ukazuje dodatek w materiałach uzupełniających do publikacji). W celu ich przewidywania stworzono przejrzysty fizycznie model, gdzie oparto się na położeniu punktów Weyla z pracy H. Y. Yang i in., *Physical Review B* 103 (2021) 115143; [DOI:10.1103/PhysRevB.103.115143](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.115143). Wyniki tego modelu dość dobrze pokrywają się jakościowo z rezultatami eksperymentalnymi przedstawionymi w publikacji.

Ostatnia praca Doktorantki, *Interplay between altermagnetism and nonsymmorphic symmetries generating large anomalous Hall conductivity by semi-Dirac points induced anticrossings*, opublikowana również w *Physical Review B*, dotyczy CrAs i zawiera wyłącznie wyniki obliczeń teoretycznych. Badany układ należy do grupy altermagnetyków – materiałów magnetycznych wykazujących łamanie symetrii względem odwrócenia czasu przy zerowym całkowitym momencie magnetycznym i nierelatywistycznym rozszczepieniu spinowym pasm energetycznych [Šmejkal i in., *Physical Review X* 12 (2022) 031042; [DOI:10.1103/PhysRevX.12.031042](https://doi.org/10.1103/PhysRevX.12.031042)]. Może on więc wykazywać anomalne zjawisko Halla, w przeciwieństwie do kanonicznych antyferromagnetyków. Materiał ten jest przedstawicielem grupy przestrzennej Pnma, charakterystycznej dla perowskitów (wykazuje jednak więcej symetrii niż układy trójskładnikowe i różni się od nich właściwościami magnetycznymi).

Obliczenia były tu przeprowadzone osobno z pominięciem oraz z uwzględnieniem oddziaływania spin-orbita. Altermagnetyzm został znaleziony w przypadku uporządkowania magnetycznego typu C (a nie występuje w pozostałych przypadkach, A i G). Rozważane uporządkowania są typu kolinearnego (podczas gdy obraz fizyczny przy uporządkowaniu niekolinearnym, które odpowiada obserwowanemu stanowi podstawowemu, wymaga dalszych badań). Obliczenia skoncentrowały się na analizie struktury pasmowej wzdłuż kierunku Γ –R w pierwszej strefie Brillouina, wzdłuż którego występuje charakterystyczne dla altermagnetyzmu nierelatywistyczne rozszczepienie spinowe pasm (współtworzonych głównie przez orbitale d atomów Cr) sięgające niemal 0,5 eV (jest ono obecne w większej części przestrzeni pierwszej strefy Brillouina, np. również w kierunku Γ –U). Na brzegach pierwszej strefy Brillouina znaleziono punkty sugerujące występowanie fermionów pół-Diraca, czemu sprzyjają symetrie niesymorficzne. Taka sytuacja generuje liczne punkty przecięć i antyprecięć pasm; wzdłuż badanej ścieżki występują 2 punkty przecięcia odpowiadających temu samemu znakowi wartości własnej operatora poślizgu oraz 2 punkty antyprecięcia odpowiadające przeciwnemu znakowi.

Kolejny etap obliczeń uwzględnia oddziaływanie spin-orbita, które powoduje selektywne znoszenie degeneracji pasm ze względu na spin. Zjawisko to jest jakościowo i ilościowo zróżnicowane w zależności od rozważanego kierunku wektora Néela uporządkowania magnetycznego. Ciekawe jest spostrzeżenie, że dla jednej z orientacji wektora Néela struktura pasmowa odpowiada istnieniu fermionów klepsydrowych [*hourglass fermions*, Z. Wang i in.,

Nature 532 (2016) 189; [DOI:10.1038/nature17410](https://doi.org/10.1038/nature17410)]. Dla innej orientacji, jeden z punktów przecięcia jest chroniony ze względu na symetrie i nie ulega rozszczepieniu przez oddziaływanie spin-orbita, przez co może prowadzić do istnienia linii węzłowej – wniosek ten może inspirować dalsze badania. Wpływ oddziaływania spin-orbita sprzyja istnieniu wielu obszarów o znacznej krzywiznie Berry’ego, a co za tym idzie, znaczącym wartościom anomalnego przewodnictwa Halla. Ta wielkość stanowi finalny przedmiot zainteresowania Autorki. Obliczenia pozwoliły stwierdzić, że zwiększona anomalna przewodność Halla występuje w kierunkach prostopadłych do wektora Néela, co stanowi wniosek o istotnej wadze. Uzyskane wyniki teoretyczne mają potencjał inspirowania dalszych badań dotyczących właściwości tego interesującego materiału topologicznego.

W kontekście tej publikacji nasuwa się pytanie dotyczące helimagnetycznego stanu podstawowego – czy na podstawie wyników dla fazy kolinearnej można próbować przewidywać jakościowo zachowanie układu w fazie niekolinearnej? Jaka jest długość wektora propagacji opisującego uporządkowanie helimagnetyczne w stosunku do stałych sieci? Czy można założyć, że namagnesowanie jest w przybliżeniu kolinearne w obszarze odpowiadającym objętości badanej w pracy komórki elementarnej – czy też zmienia się ono znacząco w już skali długości porównywalnej ze stałą sieci? Nasuwa się również pytanie jak silne zewnętrzne pole magnetyczne jest potrzebne, aby przemagnesować układ do fazy kolinearnej?

Według załączonych oświadczeń, w każdej z prac cyklu Doktorantka wykonała obliczenia oparte na formalizmie DFT oraz zwizualizowała wyniki teoretyczne, a także napisała bądź pierwszą wersję manuskryptu pracy (w *Journal of Applied Physics*) bądź część teoretyczną w przypadku pracy zawierających wyniki doświadczalne (w *Applied Surface Science*) i uczestniczyła w dyskusji wyników.

Rozprawę zamykają uwagi końcowe przede wszystkim uwypuklające znaczenie badanych klas układów oraz przewidywanych zjawisk i mechanizmów fizycznych dla rozwoju spintroniki i konkretnych jej urządzeń.

Oceniam, że struktura przedstawionej rozprawy, z wprowadzeniem oraz przedmowami do poszczególnych publikacji, jest poprawna i służy efektywnej prezentacji treści, w tym podkreśla motywację podjętych badań, znaczenie wyników oraz potencjał ich zastosowań. Publikacje cyklu uważam za wartościowe, dobrze i komunikatywnie napisane oraz wystarczająco szczegółowe. Tematyka badawcza Doktorantki zawiera, jako motyw przewodni, pojęcie symetrii i koncentruje się na materiałach w których łamana jest symetria względem odbicia w czasie i współwystępuje oddziaływanie spin-orbita. Obliczenia zostały przeprowadzone zarówno dla bardziej klasycznych układów ferromagnetycznych, które stanowią wielowarstwy magnetyczne oparte na Pt/Co/Re, mające zastosowania w obszarze spintroniki, jak i dla znacznie nowszej, bardzo obiecującej poznawczo i aplikacyjnie klasy materiałów topologicznych. Obecna w pracach składających się na rozprawę tematyka altermagnetyzmu jest bezsprzecznie zupełnie nowa,

zapoczątkowana ledwie 3 lata temu, a o jej rozwoju świadczy niezwykle dynamiczny, wykładniczy wzrost liczby publikacji obejmujących tę problematykę (wg. bazy Scopus: 6 w 2022 r., 29 w 2023 r. i aż 154 w 2024 r.). Dobrze to świadczy o doborze przedmiotu obliczeń. Również ta bardziej klasyczna część badań, dedykowana materiałom wielowarstwowym, wpisuje się w znaczący nurt badawczy – warto tu zauważyć, że praca H. Yang i in., *Physical Review Letters* 115 (2015) 267210; DOI:10.1103/PhysRevLett. 115.267210 dotycząca dość wąskiej problematyki oddziaływania DM na granicy warstw Pt/Co osiągnęła ponad 560 cytowań (wg. bazy Scopus) i ponad 760 (wg. Google Scholar). Dowodzi to dużego znaczenia podjętej tematyki.

Pytania i komentarze pojawiające się w kontekście lektury poszczególnych publikacji cyklu zostały wplecione w ich dyskusję w recenzji. Pewne uwagi krytyczne nasuwają mi się przede wszystkim w kontekście lektury samego wprowadzenia do cyklu publikacji - przedstawiam je poniżej, z obowiązku recenzenta. Ogólnie, wstęp jest napisany w sposób czytelny, ale zdarzają się niezbyt zręczne sformułowania czy pewne skróty myślowe, jak na przykład:

„the highest value of L results in the lowest in energy” – s. 1.

“behaviour of the half-integer particles” – s. 1.

“two equal but opposite sublattices” – s. 2.

“these systems are non-conventional due to their even-parity wave in the k-space” – s. 5.

„The equation for the Hall’s resistivity of ferromagnets is empirically known to follow the equation” – s. 8.

„Born Oppenheimer” – w tytule podrozdziału zabrakło „Approximation” – s. 14.

“The functional derivative δ is not a regular derivative, one can think about it as a derivative of a quantity that is a function as well.” – s. 18.

„the dependence of the system on the thickness of the FM material” – s. 26.

Pewne uwagi dotyczą również zapisu wyrażeń matematycznych we wprowadzeniu – wymienię je również z obowiązku recenzenta:

W kontekście wzoru 1.10 przydatne byłoby wyjaśnienie znaczenia symboli, a także wyjaśnienie typowej geometrii pomiarów hallowskich (*Hall bar*), aby wyklarować znaczenie indeksów xy.

We wzorze 1.13 brakuje oznaczenia składowej z dla $\mathcal{F}$ (por. wzór 2.36).

Na s. 13 nad symbolami r i R brak oznaczenia wektora.

W równaniu 2.5 α przy R powinno być w indeksie dolnym.

W równaniu 2.13 σ i σ' również powinny być w dolnym indeksie (albo w nawiasie, jako argumenty funkcji).

W równaniu 2.14 wyrażenie podcałkowe wydaje się niekompletne, a pierwszy z elementów objętości powinien wynosić d^3r_1 .

W równaniu 2.30 jest niewłaściwy indeks sumowania.

W równaniu 2.33 jest problem ze zgodnością indeksu po prawej i lewej stronie.

W równaniu 2.36 wielkość $\mathcal{F}$ ma indeksy n,z podczas gdy w równaniu 2.37 tylko n – wielkości $\mathcal{F}$ oraz A w równaniu 2.37 powinny być oznaczone jako wektory (por. wzór 1.12).

W jaki sposób wielkość wyrażona równaniem 2.39 wchodzi do obliczania σ_{xy} w równaniu 2.36? Byłoby wartościowe, aby podać po równaniu 2.36 funkcję rozkładu Fermiego-Diraca, np. w celu podkreślenia, jak do tego wzoru wchodzi temperatura czy energia Fermiego. Można by też zapisać uogólnienie wzoru na σ_{xy} dla innych składowych niediagonalnych (por. wielkości obliczane w czwartej pracy cyklu).

Na rysunku 1.3 przydałoby się wyjaśnienie, czym są zaznaczone wektory prostopadłe do płaszczyzny rysunku – rozumiem, że są to wektory $\vec{D}_{DM}$. Podobna uwaga odnosi się do rys. 1.4. Dodatkowo – rozumiem, że CW/ACW oznacza clockwise/anticlockwise. Określenie „nothing” jest tu niezbyt precyzyjne – przypadki te odpowiadają kolinearnemu ustawieniu spinów.

Uwagi edytorskie nasuwa także wykaz literatury. Często dotyczą one pisowni tytułów cytowanych prac oraz tytułów czasopism. Ponadto, pozycja bibliografii [12] zawiera pewien skrót myślowy – oczywiście oryginalna praca Rashby pochodzi z 1959 r., natomiast materiały uzupełniające do cytowanej pracy w New Journal of Physics z 2017 r. ([DOI:10.1088/1367-2630/17/5/050202](https://doi.org/10.1088/1367-2630/17/5/050202)) zawierają (skądinąd bardzo przydatne) tłumaczenie angielskie oryginalnej pracy. Cytowanie pozycji literatury [54] jest niepełne, natomiast pozycja cytowana jako [88] to opublikowana już praca M. Leiviskä i in, *Physical Review B* 109 (2024) 224430; [DOI:10.1103/PhysRevB.109.224430](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.109.224430).

Chciałbym zaznaczyć, że wymienione powyżej uwagi dotyczące wstępu do publikacji oraz pytania i komentarze inspirowane lekturą publikacji cyklu, zasygnalizowane w treści recenzji przy ich omawianiu, nie umniejszają mojej wysokiej oceny merytorycznej przedstawionej rozprawy i uzyskanych wyników.

Oprócz prac składających się na przedłożoną rozprawę, Doktorantka posiada również inny dorobek publikacyjny. Praca G. Hussain, A. Fakhredine, R. Islam, R. M. Sattigeri, C. Autieri, G. Cuono, *Correlation-Driven Topological Transition in Janus Two-Dimensional Vanadates*, *Materials* 16 (2023) 1649; [DOI:10.3390/ma16041649](https://doi.org/10.3390/ma16041649) dotyczy aktualnej tematyki układów dwuwymiarowych typu Janus, koncentrując się na obliczeniach dla $\text{VSiGeP}_2\text{As}_2$; posiada ona już 8 cytowań. Inna praca współautorstwa Doktorantki, G. Cuono, G. Hussain, A. Fakhredine, C. Autieri, *Topological Phase Diagram of $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}_{1-y}\text{Te}_y$ Quaternary Compound*, *Acta Physica Polonica A* 142 (2022) 521; [DOI:10.12693/APhysPolA.142.521](https://doi.org/10.12693/APhysPolA.142.521) przedstawia interesujące wyniki dotyczące zakresu występowania fazy trywialnej, topologicznej i ewentualnie Weyla w $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}_{1-y}\text{Te}_y$. Do dorobku publikacyjnego Doktorantki włączam również preprint C. Autieri, R. M. Sattigeri, G. Cuono, A. Fakhredine, *Dzyaloshinskii-Moriya interaction inducing weak ferromagnetism in centrosymmetric altermagnets and weak ferrimagnetism in noncentrosymmetric altermagnets* [[DOI:10.48550/arXiv.2312.07678](https://doi.org/10.48550/arXiv.2312.07678)], dyskutujący fizykę altermagnetyzmu w RuO_2 , CrSb i MnTe , cytowany wg. Google Scholar już ośmiokrotnie. Doktorantka deklaruje również w rozprawie przygotowywanie 3 manuskryptów prac poświęconych tematyce altermagnetyzmu i anomalnego zjawiska Halla.

Należy zaznaczyć sporą dynamikę cytowań prac wchodzących w skład rozprawy doktorskiej: publikacja A. Fakhredine i in., *Interplay between altermagnetism and nonsymmorphic symmetries generating large anomalous Hall conductivity by semi-Dirac points induced anticrossings* uzyskała do tej pory 25 cytowań, a praca M. S. Alam, A. Fakhredine i in., *Sign change of anomalous Hall effect and anomalous Nernst effect in the Weyl semimetal CeAlSi* – 21 cytowań (wg. Google Scholar) – praca ta należała także do dziesiątki publikacji najczęściej pobieranych ze strony Physical Review B w 2023 r. Świadczy to o wysokiej aktualności podjętej tematyki i jej znaczeniu dla innych badaczy. Cały dorobek publikacyjny Doktorantki doczekał się do chwili obecnej 67 cytowań (wg. Google Scholar) oraz 39 (wg. bazy Scopus). Można to uznać za bardzo dobry wynik, uwzględniając że najwcześniejsza praca pochodzi zaledwie z 2022 r.

Należy nadmienić, że praca doktorska była realizowana w ramach wykonywania projektu OPUS 19 2020/37/B/ST5/02299 – „Syntetyczne warstwowe struktury magnetyczne z regulowanym interfejsowym oddziaływaniem Działoszyńskiego-Moriyi, prostopadłą anizotropią magnetyczną i międzywarstwowym sprzężeniem” (konsorcjum IF PAN oraz UwB). Doktorantka prezentowała swoje wyniki w formie posterów podczas Focused Expert Meeting on Interfacing Magnetism and Superconductivity with Topological Matter w 2023 r., na Sesji sprawozdawczej IF PAN w 2022 r., jak również podczas 52nd International School & Conference on the Physics of Semiconductors "Jaszowiec 2024". Uczestniczyła w szkole Flagship School „All electron DFT with Fleur - a Hands-on Tutorial” w Forschungszentrum Jülich w 2023 r., a także w warsztatach 2D Materials for Spin-Orbitronics w Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics w 2021 r.

Uważam, że Doktorantka wykazała się dobrą znajomością warsztatu naukowego opartego na metodach obliczeniowych implementujących formalizm DFT. Zastosowała ów formalizm do bardzo interesującej klasy materiałów, uzyskując cenne wyniki mające zarówno wartość czysto poznawczą w obszarze fizyki materii skondensowanej, jak i potencjał zastosowań w zakresie spintroniki. Co więcej, część prac cechuje ścisłe powiązanie z wynikami eksperymentalnymi, które są konfrontowane z rezultatami obliczeń – takie podejście należy szczególnie docenić, prowadzi ono do bieżącej weryfikacji wartości modeli teoretycznych. Ponadto warto zauważyć, że interpretacja uzyskanych wyników obliczeń opartych na DFT jest przeprowadzana niejednokrotnie na podstawie dyskusji symetrii układu, co zdecydowanie pogłębia rozumienie przewidywań i również dobrze świadczy o warsztacie badawczym Doktorantki. Podejmowanie nowoczesnej tematyki badawczej (zarówno w samej rozprawie, jak i w pracach będących obecnie w przygotowaniu) wskazuje na dobre perspektywy rozwoju naukowego Kandydatki.

Podsumowując, jednoznacznie stwierdzam, że przedstawiona przez Panią mgr Amar Fakhredine rozprawa p.t. *Interplay between non-relativistic spin-splitting and spin-orbit coupling in metallic systems* stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego. Rozprawa ta prezentuje ogólną wiedzę teoretyczną Kandydatki w dyscyplinie nauki fizyczne oraz dowodzi umiejętności samodzielnego prowadzenia przez nią 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 Pani mgr Amar Fakhredine do dalszych etapów postępowania w sprawie nadania stopnia doktora, w tym do obrony rozprawy doktorskiej.

Kerol Sztowski