

**Recenzja rozprawy doktorskiej pana mgr. inż. Miłosza Rybaka
pt.: „Modeling magnetic van der Waals crystals using ab initio methods”**

Przedłożona do recenzji rozprawa doktorska pana mgr. inż. Miłosza Rybaka, pt. „Modeling magnetic van der Waals crystals using *ab initio* methods”, została przygotowana w ramach studiów doktoranckich na Wydziale Podstawowych Problemów Techniki Politechniki Wrocławskiej. Doktorant wykonał ją pod kierunkiem promotorów dr hab. Magdaleny Popierskiej Birowskiej oraz dr hab. inż. Pawła Scharocha.

Dysertacja, opracowana w języku angielskim, ma charakter teoretyczny, oraz formę *zbioru prac* (6 artykułów naukowych – 4 opublikowane i 2 preprinty). Rozprawa liczy łącznie 222 stron, podzielona jest na 3 rozdziały, poprzedzonych: *Podziękowaniami* (w języku polskim i angielskim), *Streszczeniem* (w języku polskim), *Abstraktem* (w języku angielskim). Część główna podzielona jest na *Wstęp*, *Publikacje* (wchodzące w cykl), oraz *Podsumowanie*. Całość zwieńczona jest *Bibliografią* (zawierającą 202 pozycji) oraz *Dodatkiem* wymieniającym dorobek Autora (wszystkie publikacje oraz uczestnictwo w konferencjach).

Rozprawa posiada formę „zbioru opublikowanych i powiązanych tematycznie artykułów naukowych” (zgodnie z *Ustawą o szkolnictwie wyższym* Art. 187 p.3). W mojej recenzji skupię się zatem głównie na „prezentacji ogólnej wiedzy teoretycznej kandydata” (Art. 187 p.1 Ustawy), czyli ocenie rozdziału 1, oraz ocenie „rozwiązania problemu naukowego” (Art. 187 p.2 Ustawy).

Omówienie Rozdziału 1:

Wstęp: rozdział przedstawia ogólnie rozumiany wstęp do omawianych „zagadnień”. Autor zaczyna od motywacji, płynnie przechodząc do opisu historycznego – **Sekcja 1.1** (osobiście preferuje odwrotną kolejność, tzn. motywację na końcu rozdziału). Opis ten zawiera krótkie omówienie związków magnetycznych z naciskiem na układy silnie dwuwymiarowe (2D). Następnie omawiane są związki MPX_3 – czyli związki istotne w kontekście prezentowanego zbioru prac. W opisie Autor wykracza po za typowe omówienie – znaleźć możemy np. opis modeli magnetycznych (strona 8) czy wzbudzeń magnetycznych (strona 10). Wstęp historyczny kończy opis ewentualnych zastosowań (wydaje mi się że ten fragment zasługuje na osobną sekcję i mógłby być połączony z sekcją



**INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ**

**im. Henryka
Niewodniczańskiego**

**POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK**

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów

Motywacje). Następnie, przechodzimy do opisu teoretycznego oraz metod komputerowych – **Sekcja 1.2**. Ten fragment jest nierozdzielnie związany z prezentowanymi pracami i dotyczy metod DFT (od strony 19). Ze szczegółami omawiane są różnego rodzaju przybliżenia (np. potencjały hybrydowe), metody (np. obliczenia sił). W przypadku rozdziału 1.2.2 dot. korelacji, Autor sięga do modelu Hubbarda, sformułowanego w ramach ciasnego wiązania / drugiej kwantyzacji. Te fragmenty stanowią bardzo cenne kompendium wiedzy na temat zastosowanych metod, co jest szczególnie istotne ze względów dydaktycznych (dla przyszłych czytelników/studentów). Jest to tym bardziej ważne, że omawia powszechnie stosowaną „czarną skrzynkę”, w postaci dostępnego oprogramowania do obliczeń DFT. W sekcji 1.2.3 prezentowany jest model Andersona pojedynczej domieszki – odniosłem wrażenie, że fragment ten jest w pewnym oderwaniu od pozostałych paragrafów (tzn. nie jest jasne jego znaczenie w kontekście obliczeń DFT – proszę o ewentualną dyskusję w trakcie obrony). Sekcja 1.2.4 prezentuje aspekt techniczny – omówiono obliczenia różnego rodzaju porządków magnetycznych, sprzężenia spin-orbita, wyznaczania stałych sprzężenia magnetycznego, *unfoldingu* pasm, teorię perturbacyjną, czy obliczenia pracy wyjścia dla powierzchni (wydaje mi się zatem że tytuł sekcji może być mylący). W **sekcji 1.3**, Autor omawia relacje obliczeń DFT z wynikami eksperymentalnymi (uzyskanymi głównie metodami spektroskopowymi, dokładniej kątowno-rozdzielczą spektroskopią fotoelektronów – z ang. ARPES). Całość rozdziału kończy podsumowanie.

Omówienie Rozdziału 2:

Zbiór prac: w tym rozdziale, Autor przedstawia 6 prac wchodzących w skład zbioru. Każdorazowo, praca poprzedzona jest opisem wkładu Autora do pracy. Prace, uzupełnione suplementami, są wynikiem współpracy z grupami eksperymentalni, łatwo jest zatem ocenić wkład Autora.

Praca 2.1 (Nano Lett.) – zbadano zmianę struktury elektronowej w trakcie magnetycznego przejścia fazowego. Badania opierają się o pomiary μ -ARPES, uzupełnione obliczeniami teoretycznymi DFT. Zaobserwowano wyraźne zmiany pasm elektronowych, związane z magnetyzmem układu.

Praca 2.2 (npj 2D Mater. Appl.) – analizowane są materiały warstwowe typu MPS_3 ($\text{M}=\text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}$), ich dopasowanie pasm energetycznych oraz stany wzbudzone. Omówiono m.in. stany zlokalizowane w ramach DFT+U.

Praca 2.3 (ACS Nano) – zbadano strukturę elektronową NiPS_3 podczas przejścia fazowego do fazy magnetycznej. Podobnie jak wcześniej, analiza bazuje na pomiarach μ -ARPES,



**INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ**

**im. Henryka
Niewodniczańskiego**

**POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK**

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów

uzupełnione obliczeniami teoretycznymi DFT. Opisano mechanizm nadwymiany, w którym uczestniczą atomy siarki.

Praca 2.4 (arXiv:2602.03600) – badane są efekty wielociałowe w NiPS_3 – sama praca bazuje m.in. na wynikach uzyskanych w ramach eksperymentu ARPES, uzupełnione o obliczenia DFT+U. W pracy zaobserwowano m.in. dodatkową strukturę przy krawędzi pasma walencyjnego, której opis wykracza po za metodę DFT+U, tzn. efektów korelacji w przybliżeniu średniego pola uwzględnionych w tej metodzie.

Praca 2.5 (Phys. Rev. B) – badano 2D antyferromagnetyki MPX_3 ($M = \text{Mn, Ni, Fe}$; $X = \text{S, Se}$). Pokazano, że obserwowane własności elektronowe, silnie zależą od orientacji momentów magnetycznych.

Praca 2.6 (arXiv:2511.22209) – rozpatrywany jest 2D heterostruktura $\text{MnPS}_3/\text{TMDC}$ ($\text{MoS}_2, \text{WS}_2, \text{MoSe}_2, \text{WSe}_2$) w dwóch różnych ułożeniach warstw. Autorzy zauważają np. rozszczepienie spinowe bez potrzeby silnych efektów relatywistycznych. W pracy wyznaczono m.in. całki wymiany (w zebrane w suplemencie). Pomimo sekcji *Computational Details*, brakuje jednoznacznej informacji jakie oprogramowanie zostało zastosowane w obliczeniach DFT oraz do obliczeń całek wymiany – zakładam, że podobnie jak uprzednio zastosowany został program VASP.

Pozytywną cechą wszystkich prac są bardzo rozbudowane suplementy, zawierające wiele informacji wykraczających po za zakres głównego tekstu.

W wielu pracach prezentowane są wyniki uzyskane w ramach eksperymentów APRES – czy przedstawione (standardowe) metody są zatem wystarczające do ich opisu? Proszę o dyskusję w trakcie obrony.

W tym punkcie uwagę przykuwa fakt znacznej liczby prac Autora (całościowo łącznie 19) opublikowanych w znamienitych czasopismach, np. Nano Lett., ACS Nano, 2D Mat., czy czasopismach z listy Phys. Rev. Dodatkowo na korzyść wpływa fakt, silnej współpracy z grupami eksperymentalnymi – niemniej, z zainteresowaniem będę śledził indywidualne osiągnięcia Autora w przyszłości.

Omówienie Rozdziału 3:

Podsumowanie: w praktyce rozdział zawiera zwarty zbiór najważniejszych osiągnięć uzyskanych w ramach publikacji zebranych w rozdziale 2.



**INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ**

**im. Henryka
Niewodniczańskiego**

**POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK**

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów

Jestem przekonany, że rozdziałem pierwszym, p. mgr inż. Miłosz Rybak udowodnił, że posiada teoretyczną wiedzę na temat tematyki zebranej w zbiorze prac. Podobnie, uzyskane wyniki potwierdzają jego wysokie kwalifikacje w zastosowaniu tej wiedzy. Wymienione wcześniej drobne uwagi, nie umniejszają wagi prezentowanych osiągnięć.

W recenzowanej rozprawie doktorskiej pan mgr inż. Miłosza Rybaka przedstawił oryginalne rozwiązanie problemów naukowych, udokumentowane kilkoma artykułami. Rozprawa spełnia zatem ustawowe kryteria stawiane rozprawom doktorskim w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauk fizycznych. W związku z powyższych wnoszę o dopuszczenie pana mgr. Inż. Miłosza Rybaka do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Dodatkowo wnoszę o wyróżnienie złożonej rozprawy. W mojej ocenie, wyniki przedstawione w rozprawie, z naddatkiem spełniają kryteria stawiane rozprawom doktorskim. Uzyskane wyniki stanowią istotny wkład w badanie oraz rozumienie podstawowych własności fizycznych związków magnetycznych van der Waalsa typu MPX_3 .



INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ

im. Henryka
Niewodniczańskiego

POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów