

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

Łódź, dn. 16.12.2024 r.

**Recenzja rozprawy doktorskiej Pani mgr inż. Joanny Marciniak**  
**p.t. *Magnetic properties of Fe-based ultrathin films – first principles calculations***

Przedstawiona rozprawa doktorska powstała w Zakładzie Teorii Nanostruktur i Materiałów Kwantowych Instytutu Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk w Poznaniu (Doktorantka kształciła się w Poznańskiej Szkole Doktorskiej Instytutów Polskiej Akademii Nauk). Rolę promotora pełni dr hab. Mirosław Werwiński, prof. IFM PAN, natomiast promotorem pomocniczym jest dr Justyna Rychły-Gruszecka. 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 przedłożoną rozprawę składają się 3 artykuły opublikowane w latach 2023–2024 w czasopiśmie 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 5 stycznia 2024 r. w sprawie wykazu czasopism naukowych i recenzowanych materiałów z konferencji międzynarodowych). We wszystkich pracach Kandydatka jest pierwszym autorem; w 2 publikacjach drugim współautorem jest promotor rozprawy, a w 1 współautorami są promotor i promotor pomocniczy. Jedna z publikacji (oznaczona [I] w rozprawie) ukazała się w prestiżowym czasopiśmie *Physical Review B* (o Impact Factorze równym 3,2 za rok 2023) o wysokiej renomie w społeczności fizyków materii skondensowanej i materiałów (tu Kandydatka jest autorem korespondującym), a 2 pozostałe ([II] i [III]) w *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* (IF równy 2,5), renomowanym czasopiśmie o wysokiej rozpoznawalności wśród fizyków zajmujących się materiałami magnetycznymi. Należy ocenić dokonany dobór czasopism jako trafny, odpowiedni do tematyki rozprawy i służący skutecznemu upowszechnianiu wyników w środowisku naukowym. Warto wspomnieć również o umieszczeniu preprintów prac na serwerze arXiv, co poszerza grono czytelników, gwarantując otwarty dostęp do pełnego tekstu.

---

<sup>1</sup> t.j. Dz. U. z 2024 r., poz. 1571.



Tematyka cyklu publikacji dotyczy teoretycznych badań właściwości magnetycznych cienkich warstw materiałów zawierających żelazo, a więc nowoczesnych materiałów niskowymiarowych; szczególną uwagę poświęcono anizotropii magnetokrystalicznej i jej zależności od grubości warstw oraz domieszkowania. Przedłożone publikacje cechuje wspólna metoda badawcza, oparta na obliczeniach mających za podstawę teorię funkcjonałów gęstości (DFT), prowadzonych z użyciem pakietu Full-Potential, Local-Orbital (FPLO) (<https://www.fplo.de/>), rozwiniętego w Leibniz Institute for Solid State and Materials Research w Dreźnie. Pakiet ów implementuje formalizm Kohna-Shama z użyciem bazy w formie zlokalizowanych orbitali.

Komentując dokonany wybór narzędzia obliczeniowego warto podkreślić, że dzięki użyciu zlokalizowanej bazy pozwala ono prowadzić obliczenia przy niższym zapotrzebowaniu na zasoby niż dla pakietów wykorzystujących bazę fal płaskich, co umożliwia analizę układów zawierających większą liczbę atomów w superkomórce. Sama dokładność wyników dotyczących energii całkowitej bywa niższa, co ciekawe jednak, wyniki cechuje słabszy rozrzut, a to predysponuje kod FPLO do badania wielkości opartych np. na pochodnych energii całkowitej [por. praca M. Richter, S.-J. Kim, K. Koepf, H. Rosner, A. Möbius, *Accuracy and Precision in Electronic Structure Computation: Wien2k and FPLO*, *Computation* 10 (2022) 28, DOI:10.3390/computation10020028 współautorstwa deweloperów oprogramowania]. Ta cecha staje się istotna z punktu widzenia wyników zawartych w rozprawie doktorskiej, której esencję stanowi porównywanie wartości energii całkowitej dla różnych stanów magnetycznych (przy różnicach energii osiągających rząd wielkości nawet 10  $\mu\text{eV/atom}$ ). Wybór narzędzia obliczeniowego można zatem ocenić jako staranny i szczególnie odpowiedni do celu obliczeń.

Cykl prac poprzedziła Autorka bardzo zwięzłym, kilkunastostronicowym wstępem – przewodnikiem w języku angielskim. Składa się na niego krótkie określenie celów i motywacji podjętych badań (w tym z uwypukleniem zastosowań w urządzeniach spintronicznych), zdefiniowanie badanych układów oraz opis metodologii teoretycznej, z podziałem na ogólne zagadnienia formalizmu teoretycznego DFT oraz pewne uwagi o charakterze praktycznym, w tym skupione na prezentacji ograniczeń podejścia badawczego. Część tę kończy omówienie zawartości poszczególnych prac cyklu, ich wyników i znaczenia, co stanowi swoistą zapowiedź treści poszczególnych publikacji. Rozprawę zamyka zwięzłe podsumowanie. Wstęp zawiera dodatkowo 40 powoływanych pozycji literatury.

Po lekturze wstępu do publikacji stanowiących cykl nasuwa się komentarz, że na pewno wartościowe dla czytelnika niezaznajomionego bliżej z konkretną klasą badanych struktur czy, w ogólności, problematyką energii anizotropii byłoby rozbudowanie owego wstępu. Przykładowo, cenne byłoby umieszczenie tam schematu struktury  $L1_0$  [zaczepniętego z pracy Autorki J. Marciniak, W. Marciniak, M. Werwiński, *DFT calculation of intrinsic properties of magnetically hard phase  $L1_0$  FePt*, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 556 (2022) 169347; DOI: [10.1016/j.jmmm.2022.169347](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2022.169347) – rys. 1 lub np. z pracy: J. Lyubina i in., *Structure and Magnetic Properties of  $L1_0$ -Ordered Fe–Pt Alloys and Nanoparticles*, *Handbook of Magnetic Materials*, tom



19, s. 291 (2011), [DOI:10.1016/B978-0-444-53780-5.00005-3](https://doi.org/10.1016/B978-0-444-53780-5.00005-3)]. Podobnie, pożądane byłoby rozbudowanie opisu badanej fazy  $L1_0$  z podaniem pełniejszego diagramu fazowego FePt (jaki zamieszczono np. w pracy J. Lyubina i in., *Structure and Magnetic Properties of  $L1_0$ -Ordered Fe-Pt Alloys and Nanoparticles* jako rys. 5.1 czy w pracy Y. Nosé i in., *Re-examination of Phase Diagram of Fe-Pt System*, *Materials Transactions* 44 (2003) 2723, [DOI:10.2320/matertrans.44.2723](https://doi.org/10.2320/matertrans.44.2723) jako rys. 7), tak aby przybliżyć np. zakres stabilności badanej fazy. Przydałaby się również definicja parametru porządku  $S$ . Myślę, że cenne we wstępie byłyby również wszelkie definicje odnoszące się do energii anizotropii magnetokrystalicznej, charakteryzujących ją stałych czy też typowych postaci zależności od kąta i ich związków z symetrią układu. Z częścią z nich czytelnik spotyka się dopiero w publikacjach stanowiących właściwą rozprawę. Ponadto, pierwszy rozdział wstępu, zarysowujący potencjalne zastosowania badanych później materiałów i nakreślający motywację, zyskałby po wzbogaceniu w rysunki schematyczne objaśniające np. komórki pamięci MRAM. W trzecim rozdziale wstępu mogłaby się znaleźć również szczegółowa charakterystyka używanego do obliczeń pakietu FPLO, stanowiąc niejako uzupełnienie wartościowych rozważań wprowadzających i ogólnych, związanych z teoretycznymi podstawami DFT. Tego typu uzupełnienia pozwoliłyby lepiej osadzić badania Autorki w szerszym kontekście i zaprezentować szczegóły formalizmu teoretycznego nie dyskutowane w samych publikacjach. Nadałaby też pracy cechę lepszej spójności i zwiększyły jej walory pedagogiczne. Niemniej uwagi te odnoszą się do samego wstępu, w oderwaniu od cyklu publikacji.

Należy wspomnieć, że swoisty punkt startowy do badań w publikacji [I] stanowiła wcześniejsza praca Autorki, J. Marciniak, W. Marciniak, M. Werwiński, *DFT calculation of intrinsic properties of magnetically hard phase  $L1_0$  FePt*, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 556 (2022) 169347, [DOI: 10.1016/j.jmmm.2022.169347](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2022.169347). W pracy tej znajduje się m. in. dość obszerny opis metodologii obliczeń, opartych na wykorzystaniu 2 pakietów implementujących DFT (w tym FPLO) oraz badaniu porównawczym wyników uzyskanych z użyciem szerokiej grupy potencjałów korelacyjno-wymiennych. Wyniki te są interesujące i świadczą o chęci dogłębnego poznania narzędzi obliczeniowych oraz optymalnego doboru i zrozumienia stosowanych przybliżeń. Rezultaty obejmowały relaksację struktury, wyznaczanie parametrów anizotropii magnetokrystalicznej oraz temperatury Curie czy wreszcie opis magnetostrykcji. W szczególności zwrócono uwagę na korelację pomiędzy wartością energii anizotropii magnetokrystalicznej a wielkością momentu magnetycznego. Praca ta ma charakter bardzo kompleksowy i wyróżnia ją staranna analiza porównawcza; Doktorantka jest tu pierwszym autorem i pełni rolę autora korespondującego. Z pewnością praca stanowi ważną pozycję w dorobku Doktorantki. Uzyskane wyniki są wspomniane i podsumowane we wprowadzeniu do cyklu prac [I–III] stanowiących rozprawę doktorską.

Przedmiot pierwszej z publikacji wchodzących w skład rozprawy [I] stanowiły cienkie warstwy FePt w strukturze  $L1_0$ , o orientacji (111) oraz (010), o zakresie grubości od 4 do 16 warstw atomowych (ML). Pracę otwiera obszerny i wartościowy dla czytelnika wstęp zawierający

bogate odniesienia do danych doświadczalnych oraz wcześniejszych obliczeń, a także przekonujące uzasadnienie podjęcia tematu. Obliczenia oparto na wcześniej zoptymalizowanych przez Autorkę stałych sieci i położeniach atomów dla masywnego FePt (por. praca J. Marciniak, W. Marciniak, M. Werwiński, *DFT calculation of intrinsic properties of magnetically hard phase L1<sub>0</sub> FePt*).

Pierwsze zbadane zostały warstwy o orientacji (111). Podstawą do określania kierunku osi łatwego magnesowania była zależność całkowitej energii od orientacji wektora namagnesowania (określona kompletnie dla warstwy o grubości 10 ML). Tu na rysunku 2 (a także na rysunku 7) w publikacji nieco brakuje skali wyrażonej w jednostkach kąta (jako uszczegółowienia znaczników opisujących kierunki krystalograficzne). Dla takich warstw o orientacji (111) stwierdzono, że kierunek osi łatwego magnesowania jest nachylony w stosunku do kierunku prostopadłego do powierzchni warstw o blisko 50°; stwierdzono również występowanie znaczącej anizotropii magnetokrystalicznej. Dalej określono zależność położenia minimum energii od grubości warstwy. W szczególności Autorce udało się przewidzieć, że dla warstwy o grubości 6 ML kierunek osi łatwego magnesowania jest nachylony pod kątem 45° do kierunku prostopadłego do powierzchni warstw (a taka wartość minimalizuje pole przelączenia, co sprzyja zastosowaniom w zapisywaniu informacji). Zależność kąta od grubości jest najsilniejsza dla małych grubości. Dla wzrastającej grubości warstwy, kierunek osi łatwej zbliża się natomiast do prostopadłego do płaszczyzny warstw o jednakowym składzie chemicznym (zawierających Pt bądź Fe) i zmienia się już wolniej. Dalsze badania skoncentrowały się na profilach momentu magnetycznego. Tutaj Autorka przewidywała istotne zwiększenie wartości momentu magnetycznego dla warstw powierzchniowych Fe i Pt w dość grubych filmach (co ciekawe, zwiększenie to obejmuje 2 warstwy atomowe przy powierzchni, podczas gdy w pozostałej objętości filmu wartości momentów nie zależą już właściwie od położenia). Dodatkowo Autorka dokonała dekompozycji momentu magnetycznego na spinowy i orbitalny, określając zachowanie obu wielkości w funkcji grubości warstw z rozdzielczością przestrzenną (stwierdzając m.in. obniżenie średniego momentu wraz ze wzrostem grubości warstwy).

Dla warstw o orientacji (010) przeprowadzone obliczenia pozwoliły stwierdzić, że oś łatwego magnesowania pokrywa się (dla każdej z rozważanych grubości warstwy) z kierunkiem prostopadłym do powierzchni warstw o jednakowym składzie chemicznym (a kierunek namagnesowania leżącego w płaszczyźnie wspomnianych warstw już bardzo słabo wpływa na wartość energii). Warstwy cechują się więc stałym kierunkiem osi łatwego magnesowania, leżącym w płaszczyźnie cienkiej warstwy (co stanowi stosunkowo nietypowy przypadek).

W wartościach energii anizotropii magnetokrystalicznej zaznaczają się ślady kwantowych efektów rozmiaru w formie niemonotoniczności zależności energii od grubości. Autorka podjęła interesującą próbę interpretacji wartości energii anizotropii w oparciu o model Bruno wiążący tę energię z różnicą wartości orbitalnego momentu magnetycznego dla kierunku osi łatwego i trudnego magnesowania, określając wkład Fe i Pt w obliczaną energię anizotropii. W szczególności rozważania profilu namagnesowania doprowadziły do stwierdzenia, że różnica



orbitalnego momentu magnetycznego w 2 prostopadłych kierunkach jest szczególnie zwiększona w powierzchniowych warstwach Fe i Pt, co sugeruje kluczowe znaczenie tych warstw dla wartości energii anizotropii magnetokrystalicznej. Co więcej, przeprowadzone obliczenia dla warstw z powierzchniową monowarstwą pozbawioną atomów Fe lub Pt (lub też z atomami Fe zastąpionymi Pt), symulujące pewnego rodzaju niedoskonałość powierzchni, pokazują istotny wpływ takich modyfikacji na energię anizotropii magnetokrystalicznej.

Według załączonego oświadczenia, Doktorantka w pracy [I] przeprowadziła obliczenia DFT (przygotowując dominującą część danych wejściowych), zwizualizowała większą część uzyskanych danych oraz brała udział w analizie wyników i napisała pierwszą wersję manuskryptu.

Tematem drugiej z publikacji Doktorantki [II], podobnej w charakterze do omówionej powyżej pracy [I], są cienkie warstwy FeNi o strukturze  $L1_0$  i orientacjach (001), (010) i (111), z analogicznym zakresem grubości jak poprzednio. Struktura rozważanych warstw została oparta na wcześniejszych obliczeniach z pracy M. Werwiński i W. Marciniak, *Ab initio study of magnetocrystalline anisotropy, magnetostriction, and Fermi surface of  $L1_0$  FeNi (tetrataenite)*, Journal of Physics D: Applied Physics 50 (2017) 495008, [DOI:10.1088/1361-6463/aa958a](https://doi.org/10.1088/1361-6463/aa958a). Interesujące są początkowe obliczenia zależności energii anizotropii magnetokrystalicznej od wartości momentu magnetycznego dla materiału litego. Wskazują one wartość niższą niż eksperymentalna (wyznaczona dla temperatury pokojowej) dla momentów o równowagowej wartości oraz znaczące maksimum dla niższej wartości momentów (co może wskazywać, że spadająca wraz z temperaturą wartość momentu magnetycznego może się przyczyniać do zwiększania energii anizotropii). W pracy Autorka przedstawiła również obliczenia struktury elektronowej FeNi. Dyskusję cienkich warstw rozpoczyna analiza energii na 1 atom w funkcji grubości warstw, co pozwala dyskutować ich stabilność. Dalej Doktorantka przedstawia wyniki dotyczące niejednorodności rozkładu momentu magnetycznego oraz ładunku (analiza populacyjna Mullikena), stwierdzając istotne różnice pomiędzy właściwościami zewnętrжных monowarstw oraz wnętrza filmu (podobnie jak dla FePt).

W przypadku warstw o orientacji (001) oś łatwego magnesowania leży w płaszczyźnie cienkiej warstwy. Dla tej geometrii zaznaczają się również bardzo wyraźne i symetryczne względem wartości dla materiału masywnego oscylacje energii anizotropii, stanowiące przejawy kwantowych efektów rozmiarowych.

Dla warstw (010) anizotropia magnetokrystaliczna zachowuje się analogicznie do przypadku FePt, z ustalonym kierunkiem osi łatwego magnesowania w płaszczyźnie cienkiej warstwy. Co ciekawe, minimum energii w funkcji kąta jest bardzo płytkie kiedy rozważać obrót wektora namagnesowania od wspomnianego położenia do kierunku prostopadłego do płaszczyzny cienkiej warstwy. Znacznie silniej jest zarysowana anizotropia ze względu na obrót namagnesowania w płaszczyźnie zawierającej jednakowe atomy. Również tutaj występują wyraźne kwantowe efekty rozmiarowe odzwierciedlone w niemonotonicznej zależności anizotropii od grubości warstwy.

Dla warstw o orientacji (111) kierunek osi łatwego magnesowania jest nachylony w stosunku do kierunku prostopadłego do powierzchni warstw, a kąt nachylenia rośnie ze wzrostem grubości warstw. Dla najcieńszych warstw kierunek ten jest niemal prostopadły do warstw, a w granicy materiału masywnego kierunek osi łatwego magnesowania odpowiada kierunkowi prostopadłemu do płaszczyzn o jednakowym składzie chemicznym. Jest to zachowanie jakościowo podobne do przewidzianego w pracy [I] dla FePt. Warto zauważyć, że kąt graniczny dla materiału masywnego jest tu bliski  $45^\circ$ , podczas gdy dla FePt przekraczał  $50^\circ$ .

Również dla tego materiału Autorka przeprowadziła interpretację anizotropii w oparciu o model Bruno, dyskutując wartości orbitalnego momentu magnetycznego i ich różnice dla różnych kierunków namagnesowania.

Według załączonego oświadczenia, wkład Autorki w pracę [II] był podobny do przypadku publikacji [I].

Trzecia ze składających się na rozprawę publikacji [III] dotyczy układów cienkich warstw Fe oraz stopu FeCo domieszkowanych atomami B, C i N, o grubości 9 monowarstw. Rozważane były pozycje międzywęzłowe domieszek o koordynacji tetraedralnej. W obliczeniach zastosowane zostało przybliżenie wirtualnego kryształu, umożliwiające uwzględnienie nieporządku chemicznego dla stopu o składzie  $\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}$ . Przeprowadzono tu relaksację położeń atomów wzdłuż kierunku prostopadłego do warstwy, co pozwoliło m.in. przedyskutować wpływ domieszek na grubość warstw i odległości międzypłaszczyznowe. W ramach otrzymanych wyników Doktorantka obszernie porównała średnie spinowe i orbitalne momenty magnetyczne oraz energie anizotropii magnetokrystalicznej dla wszystkich zbadanych układów z wartościami literaturowymi (dotyczącymi m.in. materiałów masywnych, w tym domieszkowanych, oraz warstw o znacznej grubości). Przebadany został również transfer ładunku (zakładam, że tak jak poprzednio w oparciu o metodę Mullikena, choć nie jest to explicite wspomniane w pracy) oraz wartość spinowego i orbitalnego momentu magnetycznego w funkcji położenia w warstwie. Wyniki pozwoliły w ogólności stwierdzić, że domieszkowanie FeCo zmniejsza znacząco wartość energii anizotropii magnetokrystalicznej (w przypadku C i N), natomiast dla B powoduje także zmianę jej znaku (t.j. przełączenie od preferowanego kierunku namagnesowania prostopadłego do płaszczyzny do leżącego w płaszczyźnie warstwy). Analiza rozkładu momentów magnetycznych pokazuje, że o ile dla Fe wartości momentu na powierzchni są znacząco podniesione w stosunku do tych dla wnętrza warstwy, to dla FeCo zachowanie to jest znacznie mniej wyraźne. Wprowadzenie domieszek natomiast czyni rozkład namagnesowania w funkcji położenia w warstwie wyraźnie oscylującym, a średnia wartość momentu magnetycznego jest obniżona. Moment magnetyczny na atomie domieszki jest skierowany przeciwnie do momentów na pozostałych atomach. W tej pracy również rozdzielono obliczone wartości na momenty orbitalne i spinowe. Pracę kończy krytyczna dyskusja wartości dokonanych przybliżeń. Można ocenić, że uzyskane wyniki są ciekawe i mogą przede wszystkim stanowić cenny punkt startowy do dalszych badań dotyczących czy szerszego zakresu grubości warstw (por. dyskusja



Autorki w podsumowaniu dotycząca niemonotoniczności zmian anizotropii w funkcji grubości, jak to wynika z Jej wcześniejszych prac) czy to innych koncentracji domieszek.

Według oświadczenia, w przypadku pracy [III] Doktorantka przeprowadziła obliczenia DFT oraz przeprowadziła część analizy i napisała część tekstu pracy.

W kontekście lektury rozprawy, oprócz wspomnianych komentarzy dotyczących samego wstępu, nasuwają mi się pewne pytania i uwagi, które przedstawiam poniżej:

W publikacji [I] Autorka pisze: „In addition, we also assumed a collinear arrangement of magnetic moments, which may not be well met for the film surfaces.” Czy w ramach używanego pakietu oprogramowania byłoby możliwe przeprowadzenie obliczeń dla stanu podstawowego z niekolinearnymi momentami magnetycznymi w poszczególnych warstwach? Czy można by jakościowo skomentować potencjalny wpływ występowania takich uporządkowań niekolinearnych na wyniki dotyczące anizotropii?

Odnosnie rysunku 6 w pracy [I] – ciekawe byłoby wykreślenie wartości momentów jako funkcji odwrotności grubości warstwy. To mogłoby pozwolić na wygodną ekstrapolację do przypadku materiału masywnego.

Czy do danych zawartych na rysunkach 2 i 7 w pracy [I] oraz rysunku 8 w pracy [II] można by spróbować dopasować funkcje analityczne kąta, w sposób podobny jak dla materiału masywnego? – por. chociażby praca Autorki, J. Marciniak, W. Marciniak, M. Werwiński, *DFT calculation of intrinsic properties of magnetically hard phase  $L1_0$  FePt* oraz np. T. Das i in., *Large magnetocrystalline anisotropic energy and its impact on magnetostriction of  $L1_0$ -FePt*, Journal of Physics D: Applied Physics 58 (2025) 035004, [DOI:10.1088/1361-6463/ad8001](https://doi.org/10.1088/1361-6463/ad8001) (tam rysunek S3) czy też H. Saito i T. Koretsune, *Efficient calculation of magnetocrystalline anisotropy energy using symmetry-adapted Wannier functions*, Computer Physics Communications 305 (2024) 109325, [DOI: 10.1016/j.cpc.2024.109325](https://doi.org/10.1016/j.cpc.2024.109325), lub też ogólne wyrażenie – s. 170 w J. M. D. Coey, *Magnetism and Magnetic Materials*, Cambridge University Press, Cambridge (2010). Czy taka procedura użycia wyrażeń odpowiadających symetrii układu byłaby tu owocna? Na ile jest to możliwe mimo obniżenia symetrii w stosunku do materiału masywnego wskutek istnienia powierzchni cienkiej warstwy?

W kontekście rysunku 4 w pracy [II] nasuwa mi się pytanie, czy można by w oparciu o dane policzyć energię powierzchniową i wykreślić ją w funkcji grubości warstwy? Czy analogiczne wyniki są dostępne dla FePt? Czy istnieją wyniki literaturowe dotyczące energii powierzchniowej wymienionych układów?

Zainteresowanie w literaturze przedmiotu wzbudzają mikroskopowe modele dla FePt parametryzowane całkami wymiany wyznaczonymi na podstawie obliczeń DFT – przykładowo praca O. N. Mryasov i in., *Temperature-dependent magnetic properties of FePt: Effective spin*



*Hamiltonian model*, EPL 69 (2005) 805, [DOI:10.1209/epl/i2004-10404-2](https://doi.org/10.1209/epl/i2004-10404-2) ma ponad 230 cytowań. Nasuwa mi się otwarte pytanie, czy używany przez Autorkę pakiet obliczeniowy umożliwiłby wyznaczenie parametrów takiego hamiltonianu na podstawie obliczeń energii całkowitej dla różnych uporządkowań spinowych?

Byłoby wartościowe, gdyby Doktorantka mogła przybliżyć podczas obrony model Bruno, wspomniany w kontekście analizy związku energii anizotropii z różnicami wartości orbitalnego momentu magnetycznego.

Należy podkreślić, że wymienione powyżej uwagi, komentarze i pytania nie umniejszają mojej wysokiej oceny merytorycznej przedstawionej rozprawy. Publikacje składające się na nią oceniam jako starannie przygotowane i wartościowe, o dużym wkładzie Doktorantki. Doceniam obszerne wstępy w pracach [I] i [II] oraz kompletność prezentacji uzyskanego materiału. Pozytywnie odbieram np. umieszczenie w pracach [I] i [II] danych o położeniach atomów, pozwalających na pełne odtworzenie geometrii badanych struktur (w formie tabel).

Na dorobek publikacyjny Doktorantki, oprócz 3 publikacji stanowiących trzon rozprawy doktorskiej, składają się jeszcze 2 prace indeksowane przez bazę Scopus. Jedna z nich to wspomniana już wcześniej publikacja w *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* z 2022 r. podsumowująca wyniki uzyskane w ramach tworzenia pracy magisterskiej i stanowiąca pewien punkt wyjścia do badań podjętych w doktoracie (Doktorantka jest tu pierwszym autorem i autorem korespondującym). Publikacja ta zasługuje również na wysoką ocenę, jest staranna metodologicznie i dość dobrze cytowana. Druga z prac to krótki artykuł pokonferencyjny opublikowany w 2024 IEEE International Magnetic Conference - Short papers (INTERMAG Short papers), podsumowujący m.in. wyniki zawarte w rozprawie.

Doktorantka jest również współautorką pracy W. Marciniak, J. Marciniak, J. Á. Castellanos-Reyes, M. Werwiński, „Giant magnetocrystalline anisotropy energy in Fe–Co alloy under uniaxial compression: first-principles prediction” dostępnej jako preprint [[DOI:10.48550/arXiv.2409.11388](https://doi.org/10.48550/arXiv.2409.11388)]. Inny preprint Jej współautorstwa to W. Marciniak, J. Marciniak, J. Á. Castellanos-Reyes, J. Rusz, „Mode-Dependent Phonon Relaxation in fcc Ni: Insights from Molecular Dynamics Simulations with Frozen-Trajectory Excitations” [[DOI:10.48550/arXiv.2409.20334](https://doi.org/10.48550/arXiv.2409.20334)]. Oba preprinty pochodzą z drugiego półrocza 2024 r. i powstały we współpracy z grupą badawczą z Uniwersytetu w Uppsali, co dobrze świadczy o rozwoju naukowym Doktorantki i wskazuje na poszerzenie tematyki badawczej.

Cały dorobek publikacyjny Doktorantki doczekał się do chwili obecnej 12 cytowań (wg. bazy Scopus) oraz 20 (wg. Google Scholar), co należy uznać za dobry wynik, uwzględniając że najwcześniejsza praca pochodzi zaledwie z 2022 r.

Warto wspomnieć o bogatym dorobku Doktorantki powiązanym z prezentacją wyników podczas konferencji naukowych. Obejmuje on 6 wystąpień ustnych oraz 2 postery osobiście



prezentowane i powiązane z tematyką rozprawy, uzupełnione o współautorstwo kilkunastu referatów ustnych i kilku posterów zarówno w ramach tematyki doktoratu, jak i poza nią (w tym także w zakresie biofizyki). Doktorantka prezentowała aktywnie swoje wyniki podczas międzynarodowych konferencji tematycznych, takich jak Physics of Magnetism w 2021 i 2023 r. oraz innych, jak np. Workshop on Applications of Scanning Probe Microscopy STM/AFM 2022 i 2023, Open Readings - International Scientific Conference for Students of Physics and Natural Sciences (2022, 2023 i 2024) czy NanoTech Poland 2024. Tak wysoka aktywność w zakresie prezentacji i dyskusji wyników w środowisku naukowym zasługuje na uznanie.

Podczas studiów II stopnia Doktorantka otrzymywała stypendium w ramach projektu NCN Sonata Bis 8 „Nanostruktury warstwowe do zastosowań w spintronice oraz jako magnesy trwałe” (2018/30/E/ST3/00267); same wyniki uzyskane w rozprawie doktorskiej i opublikowane w pracach [I–III] również stanowią element tego projektu. Warto zauważyć, że Doktorantka jest absolwentką studiów II stopnia zarówno na kierunku fizyka techniczna (tu ze specjalizacją w zakresie biofizyki), jak i inżynieria materiałowa (gdzie tematyka pracy magisterskiej jest podsumowana w omówionej już publikacji w Journal of Magnetism and Magnetic Materials). Należy dodać, że Doktorantka odbyła łącznie ponad roczny staż naukowy na Wydziale Fizyki i Astronomii Uniwersytetu w Uppsali.

Aktywność Doktorantki uzupełniają osiągnięcia w dziedzinie popularyzacji nauki. Wspomnę tu ciekawy, udostępniony on-line eksperyment „Fizyka w kuchni: pieprz, mleko i chmura w butelce” w ramach cyklu „Fizyka Warta Poznania” realizowanego przez IFM PAN. Dopełniają go inne osiągnięcia w zakresie popularyzacji nauki oraz aktywność na rzecz środowiska doktorantów i organizacyjna (m.in. związana z konferencją Physics of Magnetism w 2023 r.).

Wspólny mianownik prac Doktorantki stanowi swoista inżynieria anizotropii magnetycznej w cienkich warstwach – w zakresie poszukiwania grubości i orientacji warstw odpowiadającej szczególnie korzystnym parametrom (w pracach [I] i [II]) czy też możliwości kontroli tej anizotropii domieszkowaniem (co zasygnalizowano w pracy [III]). Należy pozytywnie ocenić sam dobór tematu, jako że odpowiada on zagadnieniom mającym znaczenie praktyczne, obok znaczenia czysto poznawczego w dziedzinie fizyki cienkich warstw magnetycznych. Zagadnienia zapisu informacji i inżynierii materiałów temu służących należą bowiem do kluczowych dla rozwoju cywilizacji. Śledząc liczbę publikowanych artykułów poświęconych FePt (wg. bazy Scopus), stwierdzić można znaczny wzrost zainteresowania tą tematyką około 2000 r. a samo zainteresowanie wciąż utrzymuje się na znaczącym poziomie. Wiele prac dotyczy nanocząstek FePt, a najczęściej cytowana praca [S. Sun i in., *Monodisperse FePt Nanoparticles and Ferromagnetic FePt Nanocrystal Superlattices*, Science 287 (2000) 1989, DOI:10.1126/science.287.5460.1989], poświęcona syntezie nanocząstek, ma ponad 6100 cytowań! Jednak zagadnienie anizotropii magnetycznej warstw również przyciąga znaczną uwagę – przykładowo praca S. Okamoto i in., *Chemical-order-dependent magnetic anisotropy and exchange stiffness constant of FePt (001) epitaxial films*, Physical Review B 66 (2002)



024413, [DOI:10.1103/PhysRevB.66.024413](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.024413) uzyskała ponad 400 cytowań (dotyczy ona badań doświadczalnych anizotropii w cienkich warstwach FePt). Analogiczna analiza dotycząca publikowanych prac o FeNi wskazuje na tendencję rosnącą ich liczby, a więc zwiększające się stopniowo zainteresowanie w ostatnich latach. W związku z tym należy ocenić, że wybrany temat lokuje się z pewnością wśród aktualnych. Modelowanie teoretyczne anizotropii w materiałach o fazie L1<sub>0</sub> samo w sobie jest wciąż przedmiotem prac badawczych – można tu wspomnieć np. najnowszą chyba publikację na ten temat, H. Saito i T. Koretsune, *Efficient calculation of magnetocrystalline anisotropy energy using symmetry-adapted Wannier functions*, Computer Physics Communications 305 (2024) 109325, [DOI: 10.1016/j.cpc.2024.109325](https://doi.org/10.1016/j.cpc.2024.109325) (dotyczącą FePt i FeNi). Nota bene, w tej pracy analizowano zależności kątowe i dla przypadku FeNi skonstatowano, że poziom błędów numerycznych (w obliczeniach w bazie fal płaskich) utrudnia precyzyjną analizę (ze względu na małe różnice energii), podczas gdy w przypadku użycia kodu FPLO w rozprawie doktorskiej problem ten nie występował. Potwierdza to raz jeszcze trafność wyboru narzędzia obliczeniowego.

Należy stwierdzić, że Doktorantka wykazuje się kompleksową znajomością warsztatu badawczego w zakresie obliczeń z pierwszych zasad dotyczących właściwości magnetycznych. Jest świadomą i kompetentną użytkowniczką pakietów oprogramowania służących do takich obliczeń, uzyskując wartościowe wyniki. Co więcej, jest zdolna do starannej, krytycznej analizy uzyskanych rezultatów, co świadczy o pewnej dojrzałości. Same uzyskane wyniki są interesujące, ponadto wykazują pewien potencjał w zakresie zastosowań w dziedzinie konstrukcji urządzeń spintroniki i projektowania niezbędnych dla jej rozwoju materiałów magnetycznych. Tematyka publikacji Doktorantki nie wchodzących w skład rozprawy (przede wszystkim preprintów) oraz zwłaszcza tematyka jej ostatnich wystąpień konferencyjnych świadczy o rozszerzeniu zainteresowań na zagadnienia obejmujące zarówno dalsze badania anizotropii magnetokrystalicznej dla innych materiałów, jak i np. analizy dynamiki namagnesowania. Dobrze to świadczy o perspektywach rozwoju naukowego Doktorantki.

**Podsumowując, jednoznacznie stwierdzam, że przedstawiona przez Panią mgr inż. Joannę Marciniak rozprawa p.t. *Magnetic properties of Fe-based ultrathin films – first principles calculations* 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 Molekularnej PAN o dopuszczenie Pani mgr inż. Joanny Marciniak do dalszych etapów postępowania w sprawie nadania stopnia doktora, w tym do obrony rozprawy doktorskiej.**

/podpisał: dr hab. Karol Szałowski, prof. UŁ/