

19/03/2023, Warszawa

Prof. dr hab. Krzysztof Byczuk

Instytut Fizyki Teoretycznej
Wydział Fizyki
Uniwersytet Warszawski
Pasteura 5
02-093 Warszawa

Recenzja rozprawy habilitacyjnej dr Andrzeja Biborskiego

Omówienie zawartości dokumentacji habilitacyjnej

Wniosek dra Andrzeja Biborskiego z dnia 22/07/2022 o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne, złożony do Centralnej Komisji do Spraw Stopni i Tytułów zawiera: dane wnioskodawcy, kopię dyplomu doktorskiego, wykaz osiągnięć naukowych, oświadczenia współautorów, autoreferat i kopie publikacji.

Ze wszystkimi dokumentami zapoznałem się szczegółowo.

Tytuł rozprawy habilitacyjnej jest następujący: **Uniwersalna rola korelacji elektronowych na przykładzie układów nisko-wymiarowych.**

Jednostką przeprowadzającą postępowanie habilitacyjne jest Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie .

Omówienie przebiegu kariery naukowej habilitanta

Dr Andrzej Biborski otrzymał tytuł doktora w 2010 roku na podstawie pracy „*Chemical ordering kinetics and vacancy thermodynamics in B2 binary intermetallics: simulation study*” pod promotorstwem prof. dra hab. Rafała Abdank-Kozubskiego i dr Veronique Pierron-Bohnes. Pracę doktorską realizował na dwóch uczelniach: Uniwersytet Jagielloński w Krakowie, Polska i Uniwersytecie Strasburskim we Francji.

Po doktoracie habilitant pracował w firmie komercyjnej jako programista, po czym w 2013 roku podjął prace w Akademickim Centrum Nanotechnologii w AGH w Krakowie. W tym czasie rozpoczął badania w nowej tematyce we współpracy z prof. Jozefem Spałkiem z Uniwersytetu Jagiellońskiego będąc nawet promotorem pomocniczym pracy doktorskiej dra Andrzeja Kądziaławy.

Habilitant jest współautorem 34 publikacji naukowych z czego 9 stanowi omawiana rozprawę habilitacyjną, a 18 innych zostało opublikowane już po otrzymaniu tytułu doktora.

Liczba cytowani wynosi 122 wg. Web of Science, a index H=7 (dane z lipca 2022 roku). Obecna liczba cytowani 132.

Omówienie dorobku w ramach przedstawionego dzieła

Jako dorobek naukowy stanowiący rozprawę habilitacyjną dr Biborski wybrał 9 publikacji z okresu 2014-21. Sześć z nich zostało opublikowane w Phys. Rev. B, jedna w New Journal of Physics, jedna w Scientific Reports i jedna w Computer Physics Communications. Są to dobre typowe czasopisma, w których wyniki badań tego typu, co prowadzi dr Biborski, na ogół się publikuje. Nie ma w tym zestawie pracy jedno-autorskiej.

Celem naukowym tych prac było przebadanie efektów zaindukowanych silnymi oddziaływaniami między elektronami w układach niskowymiarowych. Skupiono się na układach wodorowych w pracach [H1-5], miedzianowców nadprzewodzących [H6-7] oraz kropkach kwantowych [H8-9].

W ramach podejść teoretycznych korzystano z formalizmu drugiej kwantyzacji i wyznaczano mikroskopowe parametry modelowego hamiltonianu. Następnie poszukiwano ścisłych stanów własnych dla małej liczby elektronów, czyli dla małych układów. Procedura ta, o akronimie EDABI, była rozwijana od lat w grupie prof. Spałka.

W ramach takich obliczeń poszukiwano możliwych przejść metal-izolator typu Motta-Hubbarda, niestabilności Peierlsa, różnych niekonwencjonalnych faz nadprzewodzących.

Układom wodorowym poświęcono 5 prac [H1-5]. W pracy [H1] badano molekuly H_2 oraz $(H_2)_2$ w dwu-węzłowym rozszerzonym modelu Hubbarda wykorzystując orbitale 1s. Optymalizując funkcje Wanniera znajdowano mikroskopowe parametry układu, którego Hamiltonian w formalizmie drugiej był ściśle rozwiązywalny. Badano względne położenia jonów i ich fluktuacje nieharmoniczne w wysokim rzędzie. Otrzymano dość dobre oszacowania energii stanu podstawowego i odległość między jonami. W pracy [H2] zaprezentowano szczegółowe rozwiązania programistyczne dla metody EDABI na przykładzie łańcucha wodorowego $(H_2)_n$. W szczególności zrównoleglenie procedury obliczeniowej miało istotny wpływ na dalszy jej sukces w rozwiązywaniu problemów fizycznych. Doświadczenia programistyczne habilitanta okazywały się kluczowe w tym sukcesie. W pracy [H3] analizowano aspekt atomizacji układu atomowo-łańcuchowego w ramach procedury EDABI. Opisano przejście z układu kolektywnego do układu zatomizowanego zbudowanego z molekuł H_2 . Przejście to jest w pewnym sensie rozumiane jako przejście metal-izolator typu Motta-Hubbarda. W pracy tej uwzględniono także długozasięgową część oddziaływania Kulomba, typowo zaniedbywaną w analizie lokalizacji Motta. W pracy [H4] w ramach procedury EDABI analizowano dwuwymiarowy układ, zbudowany z pionowo ułożonych cząsteczek H_2 do opisu przejścia metal-izolator Motta-Hubbarda. Zaobserwowany w obliczeniach numerycznych nieciągłe przejście fazowe do kwaziatomowego stanu na skutek zmiany przełożonych sił. Przejście to ma charakter dwustopniowy i związane jest ze zmianą długości wiązań atomowych i stałej sieci. Są to typowe zmiany obserwowane w przejściach Motta-Hubbarda w różnych układach eksperymentalnych. Omawiane przejście w tej pracy może być powiązane z metalizacją wodoru w wysokich ciśnieniach. Ostatnia praca w tym cyklu [H8] poświęcona jest łańcuchowi wodorowemu. Parametry modelu są znajdowane metodą optymalizacji, a wielociałowy problem rozwiązany jest w ramach ansatzu funkcji falowej Jastrowa optymalizowanej w ramach podejścia wariacyjnego Monte Carlo. Znalaziono przejście do fazy atomowej związane z

dystorsją charakterystyczną dla przejść typu Peierlsa. Pokazano, że między-elektronowe wzmacniają dystorsje Peierlsa.

Kolejnym wątkiem w ramach osiągnięcia habilitacyjnego są własności nadprzewodników wysokotemperaturowych opartych na płaszczyznach miedziowo-tlenowych. W pracy [H6] analizowany trój-pasmowy model typu p-d z lokalnym oddziaływaniem typu Hubbarda pomiędzy tymi samymi i różnymi orbitalami. Problem był rozwiązywany w sposób przybliżony w ramach wariacyjnej funkcji falowej pochodzącej od Gutzwillera. Pokazano, że parowanie d-d jest dominujące dla nadprzewodnictwa. Pokazano, że parowanie jest maksymalizowane w obszarze gdzie układ jest średnio skorelowany. Dokonano także porównań z modelem jednopasmowym. W kolejnej pracy [H7] kontynuowano ten wątek korzystając z funkcji falowej Gutzwillera i Jastrowa oraz metody wariacyjnej Monte Carlo. Potwierdzono dominujący charakter parowania typu d oraz przebadano magnetyczne niestabilności układu. Zgodność z wcześniejszymi pracami teoretycznymi i pewnymi wynikami doświadczalnymi jest przedstawiona.

Ostatnia grupa prac poświęcona jest układom nanoskopowym, czyli tzw. kropkom kwantowym. W publikacji [H8] wykorzystano metodę EDABI w analizie nanoskopowego układu kropki kwantowej w kształcie ringu. Taki model, ze względu na wygodne warunki brzegowe jest łatwiejszy do analizy w porównaniu z dwuwymiarową kropką kwantową. Tutaj aspekt jednowymiarowy jest ułatwieniem. Przebadano stanu dwu- i trój-elektronowe. Wyznaczono funkcje falowe i funkcje korelacji oraz energie i rozkłady ładunku. W pracy [H9] podjęto badania kropki kwantowej na bazie sieci kwadratowej z użyciem wariacyjnej metody Monte Carlo. Wyznaczono stan podstawowy dla różnych wypień pasma oraz określono funkcje korelacji związane z antyferromagnetyzmem, nadprzewodnictwem oraz określono relacje dyspersji wzbudzeń elementarnych.

Badania przedstawione w ramach osiągnięcia mają charakter teoretyczny i są oparte na połączeniu metod analitycznych metodami numerycznymi. Stanowią ważny i interesujący wkład w dziedzinie silnie skorelowanych elektronów, gdzie brak ścisłych rozwiązań jest raczej regułą. Związek z konkretnymi układami doświadczalnymi pozostaje jednak w relacji raczej jakościowej. Dla niektórych z analizowanych modeli trudno jest znaleźć nawet eksperymentalne odniesienie. Jednak z teoretycznego punktu widzenia i rozwoju nowych metod obliczeniowych w fizyce skorelowanych elektronów omawiane osiągnięcia są ważne.

Omówienie oświadczeń współautorów

Oświadczenia współautorów nie pozostawiają złudzeń, że dr Biborowski odgrywał ważną rolę w tych pracach.

Omówienie dorobku poza habilitacyjnego

Dorobek publikacyjny, poza osiągnięciami habilitacyjnymi i pracami w ramach doktoratu zawiera 18 artykułów naukowych co stanowi bardzo dobry wynik. Są one związane z różnymi aspektami analitycznymi i numerycznymi w teorii układów silnie skorelowanych elektronów. Habilitant przedstawiał swoje wyniki na wielu konferencjach naukowych i zaproszonych seminariach. Współorganizował 3 konferencje z Zakopanem. Był lub jest wykonawcą w 7 projektach (grantach) naukowych. Niestety nie może pochwalić się żadnym grantem, w którym byłby kierownikiem. Habilitant odbył kilka kilkudniowych wyjazdów dających w pewnym sensie namiastkę stażu

podoktorskiego za granicą. Z drugiej strony, podejmując pracę na AGH zmienił swój kierunek badań w stosunku do tematyki pracy doktorskiej o 180 stopni. Jest to więc jego nowe doświadczenie naukowe po otrzymaniu stopnia doktora.

Działalność dydaktyczna i na rzecz popularyzacji fizyki

Habilitant prowadził ćwiczenia na Uniwersytecie Jagiellońskim w okresie swoich studiów doktorskich. Później nie brał udziału w dydaktyce, co pewnie związane jest z charakterem jego zatrudnienia. Brał jednak udział, jako promotor pomocniczy, w pracach nad rozprawą doktorską pana Kądziaławy. Był też opiekunem pracy inżynierskiej obronionej na AGH w 2020 roku.

Wnioski i rekomendacja

Zapoznawszy się z materiałami habilitacyjnymi pana Andrzeja Biborskiego zauważam, że jest on doświadczonym badaczem specjalizującym się w zagadnieniach korelacji elektronowych w układach niskowymiarowych i w metodach numerycznych służących do ich opisu.

Materiał przedstawiony jako dorobek habilitacyjny uważam za wystarczający i stanowi on jedynie wycinek całego dorobku habilitanta. Wierzę, że rozwinięte przez niego metody zyskają popularność wraz z upływem czasu. Dają one bowiem wgląd w fizykę niezwykle złożonych układów fizycznych, których analiza jest niezwykle trudna.

Dlatego pozytywnie oceniam dorobek habilitanta i całokształt jego działalności badawczej i wnioskuję za nadaniem mu stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne.

Krzysztof Byczuk

