



Prof. dr hab. Bogdan Bułka
Instytut Fizyki Molekularnej PAN

ul. Mariana Smoluchowskiego 17, 60-179 Poznań

E-mail: bulka@ifmpan.poznan.pl; tel. 61 8695-152

Recenzja rozprawy habilitacyjnej

„*Uniwersalna rola korelacji elektronowych na przykładzie własności wybranych układów nisko-wymiarowych*”

oraz ocena dorobku naukowego dra Andrzeja Biborskiego

Pan Andrzej Biborski ukończył studia fizyki i uzyskał tytuł magistra na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej, Uniwersytetu Jagiellońskiego w roku 2004. Za rozprawę doktorską pt. „*Chemical Ordering Kinetics and Vacancy Thermodynamics in B2 Binary Intermetallics: Simulation Study*” otrzymał On w roku 2010 dyplom doktorski na Uniwersytecie Jagiellońskim oraz na Université de Strasbourg. Promotorami rozprawy byli: prof. dr hab. Rafał Kozubski oraz dr Veronique Pierron-Bohnes.

Ocena osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę postępowania habilitacyjnego

W ciągu 12 lat po doktoracie dr Andrzej Biborski opublikował 16 prac (a łącznie 26) w renomowanych czasopismach naukowych. **Za podstawę postępowania habilitacyjnego uznał On osiągnięcie naukowe**

pt. „*Uniwersalna rola korelacji elektronowych na przykładzie własności wybranych układów nisko-wymiarowych*”,

na które składa się 9 opublikowanych prac, w tym 6 publikacji w *Physical Review B* (H3, H4, H5, H6, H7, H9), także w *New Journal of Physics* (H1), *Computer Physics Communications* (H2) i *Scientific Reports* (H8).¹ Wszystkie dziewięć publikacji to prace zbiorowe. Ustawa mówi, że habilitant winien posiadać osiągnięcia naukowe stanowiące znaczący indywidualny wkład w rozwój określonej dyscypliny naukowej. Z oświadczeń współautorów wynika, że habilitant miał znaczący wkład w pięciu publikacjach H2, H4, H5, H7 i H9, w których jest pierwszym autorem. We wszystkich dziewięciu pracach, prowadził obliczenia. Współautorem ośmiu publikacji był jest prof. J. Spałek – można powiedzieć, że był on mentorem tych badań.

¹ Numeracja publikacji zgodnie z listą na str.5 Autoreferatu.

Tematyka rozprawy habilitacyjnej koncentruje się na roli korelacji elektronowych: 1) w modelowych układach wodorowych, 2) kupratach oraz 3) kropkach kwantowych.

1. Korelacje elektronowe w układach wodorowych

Pierwszą część rozprawy stanowi pięć publikacji: H1-H5, o modelowaniu układów wodorowych. W autoreferacie dr A. Biborski określił swój wkład naukowy następująco: *W pracach tych wdrażałem się w podstawowe aspekty metodologii badań obejmujących opis oddziaływań elektron-elektron [H1]; rozwijałem warsztat obliczeniowy [H2], [H5]; uczestniczyłem w stawianiu i rozwiązywaniu problemów badawczych wraz z współedycją manuskryptów [H2]- [H4], by ostatecznie samodzielnie postawić zagadnienie naukowe oraz zastosować metodę VMC opanowaną w celu jego rozwiązania [H5].*

Poszukiwanie metaliczności wodoru pod ekstremalnie wysokim ciśnieniem (rzędu setek GPa) stanowi w ostatniej dekadzie aktywną dziedzinę badań eksperymentalnych i teoretycznych. Badania Habilitanta koncentrują się na własnościach hipotetycznego molekularnego kryształu wodorowego, utworzonego przez molekuly wodoru H_2 . Wiązanie kowalენტne spaja dwa atomy wodoru, i jest ono opisywane przez dwu-elektronowy stan singletowy. Zasadnicza hipoteza badawcza zakłada, że pod wpływem wysokiego ciśnienia następuje przejście fazowe kryształu do stanu metalicznego, który jest opisywany przez jedno-elektronowe funkcje falowe. Za parametr porządku opisującego to przejście fazowe Habilitant przyjął długość wiązania między atomami H , które jest wyraźnie krótsze dla molekuł H_2 niż dla wiązania metalicznego. Ciekawe rezultaty przedstawia publikacja [H5] (w pełni samodzielna publikacja Habilitanta z tej serii), gdzie m.in. pokazano, że korelacje elektronowe prowadzą do znaczącego wzrostu dystorsji łańcucha wodorowego. Ponadto badanie te pokazały, że długość wiązania jako parametr porządku nie wystarcza do opisu przejścia fazowego – konieczne jest wyznaczenie korelacji spin-spin wskazujące na lokalne splątanie dwóch elektronów, które występuje w fazie molekularnej a zanika w metalicznej.

Warto też wspomnieć o metodyce badań, opierającej się na obliczeniach ab initio (z pierwszych zasad) parametrów rozszerzonego modelu Hubbarda, konstrukcji wielo-elektronowych funkcji falowych, a następnie rozwiązanie problemu własnego metodą dokładnej diagonalizacji (ang. *Exact Diagonalization Ab Initio* – EDABI) czy przy pomocy wariacyjnej metody Monte Carlo (ang. *variational Monte Carlo* – VMC). Adaptacja tych metod do układów wodorowych pozwoliła Habilitantowi na realistyczny opis własności fizycznych. Wyznaczone parametry kinetyczne (związane z przeskokami elektronów i odpowiedzialne za strukturę pasmową) są porównywalne do parametrów oddziaływań kulombowskich, co kwalifikuje te materiały do układów o umiarkowanych korelacjach elektronowych. Opis przejścia izolator-metal typu Motta-Hubbarda i precyzyjne określenie wartości krytycznej jest tutaj niezmiernie trudne z powodu złożonej struktury pasmowej, roli dystorsji sieci oraz daleko-zasięgowych oddziaływań elektronowych.

2. Korelacje elektronowe w kupratach

Kolejne publikacje [H6] i [H7] należy wpisać do dziedziny nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego (z powodzeniem rozwijanej w Polsce przez ostatnie cztery dekady). Są one poświęcone badaniom korelacji elektronowych w płaszczyznach miedziowo-tlenowych w kupratach w modelu trójpasowym. Praca [H6] jest również wymieniana w rozprawie habilitacyjnej dra inż. M. Zegrodnika pt. „*Nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe oraz inne stany o złamanej symetrii w układach silnie skorelowanych elektronów*”, którą obroniono w roku 2019. W tych badaniach wykorzystano różne metody obliczeniowe, w tym wariacyjną metodę Monte Carlo (VMC), którą bezsprzecznie wprowadził dr A. Biborski. O ile w [H6] koncentrowano się głównie na korelacjach lokalnego parowania elektronów o różnej orbitalnej symetrii, to praca [H7] (z zasadniczym wkładem Habilitanta) w sposób kompleksowy przeprowadza analizę lokalnego parowania nadprzewodzącego wraz z uporządkowaniem spinowym oraz powstawaniem przerwy ładunkowej. Stanowi to ważne osiągnięcie Habilitanta, które przedstawia spójny opis nadprzewodnictwa domieszkowanych płaszczyzn miedziowo-tlenowych w kupratach, równocześnie wskazując na tendencję układu do tworzenia uporządkowania antyferromagnetycznego oraz na stany z przeniesieniem ładunku (indukowane silnymi korelacjami stanu izolatora Motta).

3. Korelacje elektronowe w kropkach kwantowych

Publikacje [H8] i [H9] poświęcone są badaniom nanostruktur, gdzie jak wiadomo korelacje elektronowe odgrywają ważną rolę. Pierwsza z nich [H8] dotyczy kropki kwantowej otoczonej metalicznym pierścieniem, układu w którym wykorzystując inżynierię funkcji falowej można regulować elektronowym obsadzeniem kropki i pierścienia. Dr A. Biborski wraz z drem A. P. Kądziałwą zostali jako eksperci zaproszeni przez naukowców z Uniwersytetu Śląskiego do przeprowadzenia numerycznej analizy wieloelektronowych stanów.

W pracy [H9] rola dra A. Biborskiego jest zasadnicza, przy formułowaniu problemu naukowego, metodyki i analizie wyników, oraz przy jej redakcji. Przeprowadził On badania korelacji elektronowych w sieci kropek kwantowych, problem który jest metodologicznie zbliżony do modelowania płaszczyzn kupratów (opisanych w pracy [H7]). W sieci kropek bardzo łatwo jest zmienić własności kropek kwantowych poprzez zmianę potencjału bramki i tym samym zmienić parametry modelu. Wariacyjna metoda Monte Carlo pokazała cechy zbliżone do tych znanych w [H7], mianowicie: tendencję do antyferromagnetycznego uporządkowania, powstawania przerwy ładunkowej związanej ze stanem izolatora Motta oraz nadprzewodnictwa typu d. Jednak ilościowa zależność od obsadzenia kropek (od domieszkowania) jest inna – silniej preferowane jest nadprzewodnictwo przy zwiększaniu ilości elektronów. Badania te pokazały, że mimo formalnego podobieństwa modelu kupratów i sieci kropek kwantowych, ich parametry są różne – o trzy rzędy są mniejsze w kropkach

kwantowych (rzędu meV) od tych w kupratach (rzędu eV). Dlatego uważam, że przewidywane uporządkowania w sieciach kropek będą mało stabilne, łatwo będą niszczone przez dekoherencję i dyssypację, z tego powodu nie nastąpi kondensacja lokalnych par Coopera. Mimo postępu technologicznego, nie wytworzono takich sieci elektronowych kropek kwantowych. Znane mi układy to łańcuchy do 10 kropek [J. Knörze, i in, Phys. Rev. Res. **4**, 033043 (2022)], czy plakietka 2x2 kropki [U. Mukhopadhyay, i in, Appl. Phys. Lett. **112**, 183505 (2018)].

Podsumowując, rozprawa habilitacyjna prezentuje opublikowane w renomowanych czasopismach naukowych badania korelacji elektronowych w modelowych układach wodorowych, kupratach oraz kropkach kwantowych, które oceniam jako znaczny wkład w rozwój dyscypliny naukowej.

Ocena aktywności naukowej, organizacyjnej i dydaktycznej

Dr A. Biborski opublikował łącznie 26 prac, które były cytowane 81 razy przez innych autorów, a Jego indeks Hirscha wynosi 7. Jest On współautorem pracy z roku 2022 w prestiżowym Physics Reports, która zapewne poprawi Jego niskie parametry naukometryczne. Skromna jest Jego aktywność konferencyjna, w jego CV jest jedynie 8 wystąpień konferencyjnych w okresie po doktoracie.

Działalność naukową Habilitant prowadził w macierzystej uczelni AGH, w Akademickim Centrum Materiałów i Nanotechnologii, ściśle współpracując z Zakładem Teorii Materii Skondensowanej i Nanofizyki UJ kierowanym przez prof. J. Spałką. Jak już wspomniałem wcześniej, we współpracy z fizykami z Uniwersytetu Śląskiego: prof. E. Zipper oraz prof. M. Maską, powstała publikacja [H8]. Wcześniej miał On szereg kilkutygodniowych wizyt (nie podano terminu i czasu trwania stażu) w Institute of Physics and Chemistry of Materials of Strasbourg prowadząc badania nad tezami doktoratu; oraz szkolenie we Francji ramach programu COST (przez 6 i 18 dni w roku 2006).

Dr A. Biborski chętnie był angażowany jako wykonawca w projektach badawczych przez prof. J. Spałką, dra hab. Zegrodnika i dra hab. M. Nowaka. Szkoda, że nie wystąpił On o własny grant, bo zdobycie funduszy pokazuje uznanie środowiska dla osiągnięć i działalności naukowej, stanowi certyfikat potwierdzający samodzielność naukową.

Dr A. Biborski trójrotnie aktywnie uczestniczył w pracach komitetu organizacyjnego międzynarodowej konferencji na tematy nadprzewodnictwa i magnetyzmu organizowanych pod kierownictwem prof. J. Spałką w Zakopanem w 2014, 2016 i 2018 roku.

Warto też wspomnieć o działalności dydaktycznej. Przed doktoratem prowadził On ćwiczenia dla studentów UJ, a po doktoracie wraz z drem hab. M. Zegrodnikiem opracowali nowy przedmiot ”*Computational methods in nanosystems*” dla studentów różnych wydziałów

AGH. Prof. J. Spalek powierzył Mu rolę promotora pomocniczego w rozprawie doktorskiej A. P. Kądziaławy, która została obroniona w roku 2015. ”Gra w kwanty” opracowana razem z dr hab. M. Nowakiem oraz dr hab. M. Zegrodnikiem cieszyła się sporym zainteresowaniem na Krakowskim Festiwalu Nauki (2018, 2019).

Wnioski końcowe

Mimo pewnych uwag krytycznych uważam, że rozprawa habilitacyjna, całokształt dorobku naukowego, organizacyjnego i dydaktycznego dra Andrzeja Biborskiego spełniają kryteria określone w Ustawie. Popieram wniosek o nadanie Mu stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne.

B. Bułka

Poznań, 1 lutego 2023 r.

Prof. dr hab. Bogdan Bułka

