

Prof. dr hab. Tadeusz K. Kopeć,

Wrocław, 08.02.2023

**Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych**

**im. Włodzimierza Trzebiatowskiego**

**Polskiej Akademii Nauk**

**Ul. Okólna 2, 50-422 Wrocław**



*Ocena osiągnięć Pana Andrzeja Biborskiego w związku z postępowaniem o nadanie mu stopnia doktora habilitowanego*

Dotychczasowa kariera naukowa Pana dr Andrzeja Biborskiego związana jest z Uniwersytetem Jagielloński w Krakowie, Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej, gdzie w 2004 roku ukończył studia magisterskie broniąc pracę pt.: „*Testowanie algorytmów symulacji Monte Carlo migracji atomów w nadstrukturach*”, pod kierunkiem promotora: prof. dr. hab. Rafała Kozubskiego, a w 2010 obronił pracę doktorską pt.: “*Chemical Ordering Kinetics and Vacancy Thermodynamics in B2 Binary Intermetallics: Simulation Study*”, również pod kierunkiem prof. dr. hab. Rafała Kozubskiego. Badania w tematyce związanej z pracą doktorską realizował na dwóch uczelniach Uniwersytet Jagielloński oraz na Université de Strasbourg, Francja w ramach umowy o wspólnym promotorstwie pomiędzy wymienionymi uniwersytetami. Szereg kilkutygodniowych pobytów w Institute of Physics and Chemistry of Materials of Strasbourg (IPCMS) umożliwiło Habilitantowi na zapoznanie się z warsztatem badawczym naukowców francuskich. Badania te, dotyczące



modelowania kinetyki porządkowania atomowego w związkach międzymetalicznych oraz termodynamiki defektów punktowych, zaowocowały zarówno wspólnymi publikacjami jak i uzyskaniem przez niego stopnia doktora. Opracowana podczas doktoratu metodologia termodynamiki równowagowej koncentracji wakansów w oparciu o model gazu sieciowego, wraz z dedykowanymi kodami napisanymi przez Habilitanta, była także wykorzystywana w badaniach prowadzonych w grupie prof. Kozubskiego.

Dotychczasowy dorobek naukowy Habilitanta to prac 25 prac opublikowanych w czasopismach z Listy Filadelfijskiej, przy czym:

- Sumaryczny Impact Factor wszystkich opublikowanych prac (baza JCR): 77,676

- Sumaryczny Impact Factor prac wchodzących do osiągnięcia (baza JCR): 34,366

oraz:

- Liczba cytowań bez autocytowań (Web of Science): 77

- Indeks Hirscha (Web of Science): 7

Osiągnięciem naukowym, które jest podstawą wniosku o Pana dr Andrzeja Biborskiego stopnia doktora habilitowanego, jest cykl dziewięciu publikacji w międzynarodowych czasopismach (*Physical Review A i B*, oraz *Annals of Physics*) opatrzone wspólnym tytułem:

**„Uniwersalna rola korelacji elektronowych na przykładzie własności wybranych układów niskowymiarowych”.**

Wszystkie publikacje są pracami wielo-autorskimi (od 3 do 6 autorów)



do których dołączone zostały deklaracje poszczególnych twórców odnośnie ich indywidualnego wkładu. Publikacje ukazały się w latach 2014-2021.

## 1. Ocena osiągnięcia naukowego

We wprowadzeniu do swojego autoreferatu Habilitant podkreśla, że oddziaływania między-elektronowe są czynnikiem istotnie wpływającym na mierzalne własności atomów wieloelektronowych, molekuł, jak również wielu materiałów o symetrii translacyjnej. W takich przypadkach, opis oparty o koncepcję pola średniego, w którym na elektron oddziałuje pole będące uśrednionym efektem obecności innych elektronów, jest niewystarczający lub wręcz prowadzi do wyników niezgodnych z eksperymentem.

Celem naukowym przedstawionych prac jest teoretyczne przebadanie efektów indukowanych silnymi oddziaływaniami między-elektronowymi dla wybranych układów wodorowych (publikacje [H1]- [H5]); nadprzewodzących miedzianów ([H6]- [H7]) oraz kropek kwantowych ([H8]- [H9]). W szczególności badania te skupiały się na: atomizacji (metalizacji) niskowymiarowych modeli układów molekularnych w kontekście możliwości wystąpienia przejścia Motta ; charakteryzacji niekonwencjonalnych faz nadprzewodzących oraz uporządkowania magnetycznego płaszczyzn miedziowo-tlenowych w kupratach z uwzględnieniem orbitali typu  $p$  i  $d$ ; wskazanie sygnatur stanu Motta w badanym modelu trójpasowym; określenia wpływu korelacji elektronowych na przykładzie układu kwantowego w skali nano typu kropka-pierścieni oraz możliwości fizycznej symulacji układów silnie skorelowanych za pośrednictwem dwuwymiarowych sieci kropek kwantowych. Punktem wyjścia do badań nad przytoczonymi zagadnieniami jest hamiltonian opisujący oddziałujące elektrony, w formalizmie drugiej kwantyzacji zawierający amplitudy jednocząstkowe oraz oddziaływania. Zastosowane podejścia to diagonalizacja hamiltonianu wieloelektronowego w przestrzeni Focka, czyli stacjonarnego rozwiązania równania Schrödingera dla oddziałujących fermionów. W tym kroku



posługiwano się metodą typu *Exact Diagonalization* (ED) (publikacja [H8]), także w wariacie *Exact Diagonalization Ab-Initio* (EDABI) (prace [H2]-[H4]), dla układów o niewielkiej liczbie elektronów, zaimplementowaną oraz zoptymalizowaną pod kątem wykorzystania komputerów wysokiej mocy. Drugą z metod, jest technika wariacyjnego Monte-Carlo (VMC), która umożliwia otrzymanie przybliżonego stanu wieloelektronowego dla znacznie większej liczby cząstek aniżeli ma to miejsce dla metod dokładnych. Powyższe podejścia, wraz ze standardowym aparatem matematycznym, stanowią zarys stosowanej metodyki. W praktyce Habilitant implementował szereg innych kodów – np. do rozwiązywania modeli w ramach przybliżeniu ciasnego wiązania (TBA).

**Prace, których obiektem badań były układy wodorowe** (publikacje [H1]-[H5]), których modele cechuje na tyle niski wymiar przestrzeni Hilberta, że mogą być one rozwiązane za pośrednictwem metod dokładnych. Są nimi: molekula wodoru  $H_2$  oraz układ dwu molekuł. Podstawowym celem tego opracowania było wyznaczenie stałych sprzężenia elektron-proton jak również obliczenie wartości parametrów mikroskopowych hamiltonianu danego w drugiej kwantyzacji. W celu sformułowania hamiltonianu a następnie rozwiązania problemu własnego posłużono się metodą EDABI, która jest jednym z wariantów metody dokładnej. Do opisu stanów jedno-cząstkowych posłużono się orbitalem Slatera.

**Prace, których obiektem badań był model płaszczyzny miedziowo-tlenowej** (publikacje [H6]- [H7]).

Opanowanie narzędzia badawczego w postaci wariacyjnej Metody Monte-Carlo pozwoliło Habilitantowi na zaangażowanie się w badania dotyczące opisu teoretycznego domieszkowanych płaszczyzn miedziowo-tlenowych za pośrednictwem trójpasowego modelu typu Hubbarda. Zbadano własności stanu normalnego w obszarze domieszkowania dziurowego czego efektem była praca [H6]. Następnie, Habilitant rozwinął implementację metody VMC w kierunku





możliwości uwzględnienia wyrazów anomalnych w wariacyjnej funkcji falowej. Pozwoliło mu to na przebadanie własności nadprzewodzących trójpasmowego modelu  $d-p$ . Otrzymano spójny opis domieszkowanych dziuowo płaszczyzn miedziowo-tlenowych za pośrednictwem podejścia wariacyjnego, posługując się założoną formą wariacyjnej funkcji falowej. W szczególności, potwierdzono, że mechanizm obserwowanego eksperymentalnie stanu nadprzewodzącego ma swoje główne źródło w parowaniu na orbitalach miedziowych przy mniejszym, ale nie zaniedbywalnym parowaniu inter-orbitalnym. Równocześnie wskazano tendencję układu do tworzenia uporządkowania anty-ferromagnetycznego oraz sygnaturę, indukowanego silnymi korelacjami stanu izolatora.

### **Prace, których obiektem badań były kropki kwantowe ( [H8], [H9])**

Rozwinięcie warsztatu badawczego Habilitanta poprzez prace nad własnościami modelu płaszczyzny miedziowo-tlenowej, pozwoliło mu włączyć się w dynamicznie rozwijającą się tematykę sieci sprzężonych kropek kwantowych (publikacja [H9]), jako układów skupiających w sobie wiele badanych uprzednio własności indukowanych przez korelacje elektronów. Rozwiązanie modelu sieci kwadratowej elektrostatycznie indukowanych kropek kwantowych rozważone w pracy [H9] wskazuje, że tego typu układy oparte o hetero-struktury półprzewodnikowe mogą stanowić alternatywę dla np. sieci optycznych w zakresie tzw. *symulatorów kwantowych*. Równocześnie, jak zauważa Habilitant, ich własności elektronowe w odpowiednio dobranych warunkach eksperymentalnych mogą wykazywać cechy charakterystyczne dla znanych współcześnie silnie skorelowanych materiałów, takich jak np. niekonwencjonalne nadprzewodniki wysokotemperaturowe. W opinii Habilitanta, duży potencjał w tym aspekcie mają sztuczne sieci kropek kwantowych. Stanowią one aktualnie jego główny obszar badań, w szczególności opis teoretyczny eksperymentalnie syntetyzowanych i charakteryzowanych sieci o strukturze plastra miodu. Inną -



atrakcyjną z punktu widzenia aplikacyjnego jak i badań podstawowych - dynamicznie rozwijającą się tematyką, są skrecone dwu-warstwy na bazie grafenu, w których korelacje elektronowe mogą mieć kluczową rolę na ich własności.

Cykl przedstawionych przez Habilitanta prac uwidacznia pewną uniwersalność z punktu widzenia wpływu korelacji elektronowych na własności układów charakteryzowanych różną skalą energetyczną jak i przestrzenną. Cechą wspólną rozważanych systemów jest występowanie przejścia Motta-Hubbarda. Ponadto, efekty korelacyjne mogą również generować pojawianie się tak subtelnego zjawiska jakim jest nadprzewodnictwo. Analogiczna obserwacja dotyczy własności spinowych, takich jak powstawanie uporządkowania antyferromagnetycznego.

Podsumowując tą część osiągnięcia naukowego należy jednoznacznie stwierdzić, że stanowiące je badania dotyczą bardzo aktualnego problemu. Dlatego też prace Pana dr Andrzeja Biborskiego bardzo dobrze wpisują się w eksperymentalno-teoretyczny nurt poszukiwań układów sieciowych fermionów, w których efekty związane z korelacjami elektronowymi stanowią dominujący składnik rozważanej fizyki. Autor przedstawił zbiór prac eksplorujących różnego rodzaju zjawiska fizyczne w tych układach co prowadzi do lepszego zrozumienia magnetyzmu kwantowego oraz niekonwencjonalnego nadprzewodnictwa w układach będących przedmiotem bezpośredniego zainteresowania eksperymentalnego.

## **2. Ocena pozostałych osiągnięć naukowo-badawczych oraz aktywności naukowej, dydaktycznej i popularyzatorskiej**



W okresie odbywania studiów doktoranckich Habilitant prowadził zajęcia dla studentów różnych kierunków oraz lat na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UJ. Po trzyletniej przerwie, podczas której pracował komercyjnie jako programista, Habilitant podjął pracę w nowo powstałym Akademickim Centrum Nanotechnologii (ACMiN) AGH na stanowisku asystenta (listopad 2013). Od tego czasu ściśle współpracuje z Zakładem Teorii Materii Skondensowanej i Nanofizyki (ZTMSiN) UJ. Wspólnie z dr. hab. inż. Michałem Zegrodnikiem Habilitant opracował nowy przedmiot obieralny dla studentów innych wydziałów AGH, pt. *"Computational methods in nanosystems*. Ponadto Pan dr Biborski sprawował funkcję promotora pomocniczego w pracy doktorskiej oraz był opiekunem pracy inżynierskiej. Uczestniczył także aktywnie w organizacji szeregu konferencji naukowych na Uniwersytecie Jagiellońskim. Dwukrotnie (w roku 2018 oraz 2019) uczestniczył w Krakowskim Festiwalu Nauki.

Pan dr Biborski odbył kilka staży w instytucjach naukowych, w tym zagranicznych (Francja). Habilitant wygłosił szereg referatów na konferencjach w tym zagranicznych. Brał udział także w szeregu grantach fundowanych przez instytucje krajowe (NCN, MNiSW) i zagraniczne (COST).

### **Podsumowanie**

Wszystkie przedstawione do oceny prace pokazują bardzo dobre opanowanie przez Habilitanta zaawansowanej teorii wielu ciał, metod obliczeniowych i swobodne posługiwanie się nimi zarówno od strony technicznej, jak i fizycznej interpretacji wyników. Jego prace z obszaru odnoszącego się do modeli oddziałujących fermionów wnoszą istotny wkład do fizyki szeroko rozumianych silnie skorelowanych układów.



Podsumowując, uważam, że dorobek Pana dr Andrzeja Biborskiego jest wystarczający dla uzyskania stopnia doktora habilitowanego, zgodnie z Rozporządzeniem Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego dotyczącego kryteriów oceny osiągnięć osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego. Jego osiągnięcia naukowo-badawcze, współpraca naukowa, osiągnięcia dydaktyczne i popularyzatorskie, spełniają ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane przy ubieganiu się o stopień doktora habilitowanego. Dlatego też **rekomenduję Komisji Habilitacyjnej wydanie pozytywnej opinii w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego Panu dr Andrzejowi Biborskiemu** w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizycznych.



Tadeusz K. Kopec

