

Prezentacja osiągnięcia naukowego wybranego jako podstawa
ubiegania się o stopień doktora habilitowanego

Fazy wstępowe dla dwuwymiarowego modelu Falicova-Kimballa w skończonych temperaturach

dr Lech Dębski

Zakład Fizyki Komputerowej
Wydział Fizyki UAM
Ul. Umultowska 85
61-614 Poznań
E-mail: gulf@amu.edu.pl

Poznań 2016

Spis treści

Posiadane stopnie naukowe	2
Dotychczasowe zatrudnienie	2
Wskazanie osiągnięcia będącego przedmiotem rozprawy habilitacyjnej	2
Wykaz publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe	4
Wstęp	4
1 Wprowadzenie do problematyki rozprawy	5
1.1 Model Hubbarda	5
1.2 Przedmiotowy model Falicova-Kimballa	6
4 Metoda Monte Carlo (MC) i algorytm Metropolisa	7
5 Metoda badawcza	9
5.1 Transformacja do stopni swobody typu Isinga	9
5.2 Eksperyment komputerowy typu Monte Carlo	10
6 Diagram fazowy w skończonych temperaturach i fazy wstępowe	11
7 Podsumowanie	12
8 Perspektywa dalszych badań	13
Literatura	13
Publikacje naukowe w czasopismach znajdujących się w bazie JCR	16
Publikacje naukowe w czasopismach innych niż znajdujące się w bazie JCR	18
Sumaryczny impact factor według listy JCR zgodnie z rokiem opublikowania	20
Liczba cytowań publikacji według bazy Web of Science	20
Indeks Hirscha według bazy Web of Science	20
Udział w międzynarodowych i krajowych projektach badawczych	20
Międzynarodowe i krajowe nagrody za działalność naukową	22
Referaty na międzynarodowych i krajowych konferencjach tematycznych	22
Aktywny udział w międzynarodowych i krajowych konferencjach naukowych	24
Udział w komitetach organizacyjnych krajowych konferencji naukowych	26
Udział w konsorcjach i sieciach badawczych	26
Osiągnięcia dydaktyczne i w zakresie popularyzacji nauki	26
Opieka naukowa nad studentami	27
Stáže w zagranicznych i krajowych ośrodkach naukowych	28
Podnoszenie kwalifikacji zawodowych	28
Współpraca	28
Recenzje publikacji w czasopismach międzynarodowych i krajowych	29
Inne osiągnięcia	29

Posiadane stopnie naukowe

- Praca magisterska
Efekty zaburzeń parabolicznego potencjału konformacyjnego w modelu Białka-Maszyny reakcji enzymatycznej, Poznań, 1994r.
- Rozprawa doktorska
Symulacje wybranych magnetyków o spinie 1/2, Poznań, 2001r.

Dotychczasowe zatrudnienie

- Asystent, 01.10.2000r. - 14.04.2001r., Wydział Fizyki, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu;
- Adiunkt, 15.04.2001r. - do dziś, Wydział Fizyki, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu;
- Administrator systemów komputerowych i sieci komputerowej, 2001-2008, Wydział Fizyki, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu;

Wskazanie osiągnięcia będącego przedmiotem rozprawy habilitacyjnej

Osiągnięcie będące przedmiotem rozprawy habilitacyjnej:

1. Sformułowanie problemu;
2. Zbudowanie praktycznie od podstaw aparatu badawczego w postaci programu komputerowego;
3. Przeprowadzenie obliczeń numerycznych w części 4/5;
4. Zaproponowanie sposobu analizy wyników pod kątem identyfikacji przemian fazowych;
5. Potwierdzenie istnienia faz wstęgowych w skończonych temperaturach dla dwuwymiarowego modelu Falicova-Kimballa przy połówkowym wypełnieniu;

Wykaz publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe

H1 G. Musiał, L. Dębski, G. Kamieniarz, *Monte Carlo simulations of Ising-like phase transitions in the three-dimensional Ashkin-Teller model*, *Phys. Rev. B* **66**, 012407-1 – 4 (2002)

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na udziale (1/3) w sformułowaniu problemu fizycznego, stworzeniu od podstaw kodu komputerowego na podstawie napisanego przeze mnie wcześniej programu dla przypadku dwuwymiarowego, przetestowanie i wykorzystanie do obliczeń numerycznych z kumulantą Bindera na parametrze porządku dla par stopni swobody, wykonanie części (7/10) obliczeń dla przemian ciągłych. Ponadto przygotowałem środowisko rozproszone LAM/MPI i zasugerowałem przetwarzania równoległego w programie. W dalszej części powstawania tej pracy wykonałem

analizy wyników moich obliczeń numerycznych. Wyniki zostały przedyskutowane wspólnie przez wszystkich autorów pracy, gdzie mój udział oceniam na 1/3. Dokonałem pierwszej redakcji tekstu tej publikacji, zaś do finalnego kształtu pracy wnieśli udział pozostali współautorzy. Mój udział procentowy szacuję na 48% .

- H2 J. Wojtkiewicz, G. Musiał, L. Dębski, *A Monte Carlo study of the spinless Falicov-Kimball model in the perturbative regime: preliminary results*, *phys. stat. sol. c3*, 199 - 203, (2006)

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na sformułowaniu problemu fizycznego, do czego wykorzystałem wyrażenie na hamiltonian wyprowadzony i dostarczony przez dr. hab. Jacka Wojtkiewicza, napisaniu programu komputerowego (przy częściowej pomocy dr. hab. Grzegorza Musiała), wykonaniu zasadniczej części (4/5) obliczeń numerycznych, analizie wyników, przygotowaniu wykresów, udziale w dyskusji wyników (1/3) oraz napisaniu zasadniczej części publikacji za wyjątkiem części definiującej hamiltonian i jego genezę, przygotowanej przez dr. hab. J. Wojtkiewicza. Mój udział procentowy szacuję na 80%.

- H3 L. Dębski, *2D Falicov-Kimball model in the perturbative regime at finite-temperatures*, *Acta Physica Polonica A115*, 156 (2009)

Mój udział procentowy szacuję na 100%.

- H4 L. Dębski, *The possibility of detection of finite temperature stripe ordering in 2D spinless Falicov-Kimball model*, *Phase Transitions* 89, 249 - 260 (2016)

Mój udział procentowy szacuję na 100%.

Wstęp

Na niniejszą rozprawę składają się moje najważniejsze artykuły opublikowane od 2002 do 2016 roku, które dotyczą sformułowania problemu, zbudowania praktycznie od podstaw aparatu badawczego w postaci programu komputerowego, przeprowadzenia obliczeń numerycznych w części 4/5, zaproponowanie sposobu analizy tych wyników pod kątem identyfikacji przemian fazowych a w konsekwencji potwierdzenia istnienia faz wstępowych w skończonych temperaturach w modelu Falicova-Kimballa po raz pierwszy w literaturze przedmiotu. Wyniki tych analiz prezentowałem i dyskutowałem w instytucjach naukowych i na konferencjach:

- G. Musiał, L. Dębski, Parallelization of simulations of the Monte Carlo type: 3D Ashkin-Teller Model, International Conference on Distributed computing and Grid technologies in science and education GRID'2006, Dubna (Russia), 06.26-30, 2006
- G. Musiał, L. Dębski, D. Jeziorek-Knioła, K. Gołąb, A self-scheduling scheme for parallel processing in heterogeneous environment: simulations of the Monte Carlo type, Seventh International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics, Gdańsk, 09.09-12, 2007
- G. Musiał, L. Dębski, Równoległy superkomputer z pecetów osiągalny dla każdego, VII edycja Wykładów Otwartych, Wydział Fizyki UAM, 09.01.2008 (wykład na zaproszenie)
- L. Dębski, 2D Falicov-Kimball model in the perturbative regime at finite-temperatures, The European Conference PHYSICS OF MAGNETISM 2008 Poznań, 24-27 czerwiec, 2008, Poznań
- L. Dębski, Report on Workshop Models and Theory for Molecular Magnetism, CECAM-Lyon, 2006 07.18 - 21
- L. Dębski, XVIII Minisymposium Fizyki Statystycznej, Wydział Inżynierii Mechanicznej i Informatyki, Politechnika Częstochowska, Diagram fazowy modelu Falicova-Kimballa z połowicznym wypełnieniem, 1 lipca 2013r.

oraz na różnych seminariach na terenie Wydziału Fizyki UAM. Uwagi i komentarze zgłaszane podczas tych prezentacji oraz bezpośrednio rozmowy przyczyniły się do uzupełnienia wielu niedociągnięć. Podobnie konstruktywny charakter miały krytyczne uwagi i pytania recenzentów oryginalnych artykułów, jak też uwagi wielu Koleżanek i Kolegów Fizyków.

Krótki przegląd najważniejszych rezultatów artykułów stanowiących niniejszą rozprawę poprzedzony jest wprowadzeniem modelu i do problematyki analizy przemian fazowych oraz rozdziałami omawiającymi najważniejsze metody badawcze, które zastosowano w rozprawie z prac habilitacyjnych. Zebrałem je w jednym miejscu. Natomiast przegląd ten kończą diagram fazowy z fazami wstęgowymi, podsumowanie wyników z prac habilitacyjnych, perspektywa dalszych badań oraz literatura. Przedstawiona bibliografia to tylko najważniejsze pozycje, cytowane w pracach habilitacyjnych i nie wyczerpują obszernej literatury przedmiotu. Pełniejszy wykaz jest w pracach H1 – H4 oraz w cytowanej tam literaturze.

Poznań, 10 września 2016

1 Wprowadzenie do problematyki rozprawy

Podstawowym celem rozprawy jest analiza przemian fazowych w dwuwymiarowym modelu Falicova-Kimballa (FK) i wykazanie istnienia faz wstęgowych w skończonych temperaturach, jej fizyczne i algorytmiczne aspekty. W pracach H1-H4 będących przedmiotem niniejszej rozprawy omawiam dwa najważniejsze modele fizyczne, które zastosowałem w rozprawie. Należy tutaj wspomnieć o obszarze faz mieszanych z frustracją, będącą największą trudnością w niniejszej rozprawie, który występował w badanym przeze mnie modelu Ashkina-Tellera (AT) (zob. [H1] i prace tam cytowane). Jednak stopień komplikacji problemu jest tutaj znacznie większy z uwagi na obecność nie dwóch a pięciu konkurujących członów w hamiltonianie i prowadzi w konsekwencji do skomplikowanej frustracji układu.

1.1 Model Hubbarda

Jeden z najprostszych sieciowych modeli silnie skorelowanych elektronów. Potrzeba jego wykorzystania pojawia się tam, gdzie zawodzi opis układu w przybliżeniu elektronów niezależnych. Przybliżenie to uwzględnia oddziaływanie elektronów w sposób samouzgodniony.

Model Hubbarda jest reprezentowany przez Hamiltonian

$$H = \sum_{x,y,\sigma} t_{xy} c_{x\sigma}^\dagger c_{y\sigma} + U \sum_x n_{x\uparrow} n_{x\downarrow}. \quad (1)$$

gdzie $c_{x\sigma}^\dagger$ and $c_{y\sigma}$ są operatorami kreacji i anihilacji elektronów ze spinem σ na węzłach sieci x i y . Stałe przeskoku t_{xy} są traktowane jako niezerowe tylko dla najbliższych sąsiadów x i y . U jest oddziaływaniem Coulomba na danym węźle sieci.

Jak wspominałem, model Hubbarda jest jednym z najprostszych modeli opisujących układ oddziałujących elektronów w kryształach modelowanym przez periodyczny potencjał. Hamiltonian składa się z tylko dwóch członów: operatora energii kinetycznej, opisującego ruch cząstek swobodnych w sieci krystalicznej, oraz operatora energii oddziaływania tych cząstek, mającego najprostszą postać: cząstki się odpychają, gdy znajdują się na jednym węźle, oraz nie oddziałują, gdy są na różnych węzłach. Takie oddziaływanie można uważać za uproszczony opis ekranowanego oddziaływania kulombowskiego.

Omawiany model został wprowadzony przez Johna Hubbarda w roku 1963 [1]. Pierwotną motywacją był opis ferromagnetyzmu metalicznego. Można stwierdzić, że model Hubbarda jest naturalnym "środowiskiem" do badania innych zjawisk, takich jak: inne uporządkowania magnetyczne, przejścia metal-izolator, nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe, kondensacja Bosego-Einsteina zimnych atomów w "sieci optycznej". Rola modelu Hubbarda jest więc dla teorii silnie skorelowanych elektronów równie fundamentalna, jak modelu Isinga dla teorii przejść fazowych: oba stanowią, "paradygmaty" dla swoich dziedzin.

Ścisłych wyników dotyczących modelu Hubbarda jest niewiele. To samo dotyczy wyników przybliżonych o kontrolowanej niepewności. Dzieje się tak, mimo iż od sformułowania modelu minęło już ponad 40 lat, a w tym czasie ukazało się kilka tysięcy prac na jego temat.

Jednym z problemów najlepiej zbadanych w ramach modelu Hubbarda jest zagadnienie neelowskiego uporządkowania antyferromagnetycznego. Odpowiedzialny za nie jest mechanizm odkryty przez Heisenberga w dwa lata po powstaniu mechaniki kwantowej - oddziaływanie wymienne. Okazuje się, że sprowadza się do niego model Hubbarda w określonym zakresie parametrów: przy założeniu wypełnienia połówkowego (gdy liczba elektronów jest równa liczbie węzłów) oraz jeśli współczynnik przeskoku elektronów t jest mały w porównaniu ze współczynnikiem oddziaływania kulombowskiego U .

W ramach dwuwymiarowego modelu Hubbarda podjęto wiele prób wyjaśnienia występowania faz wstęgowych. Używano do tego wielu przybliżonych metod, otrzymując też - niestety - wiele różnych konkluzji.

1.2 Przedmiotowy model Falicova-Kimballa

Model Falicova-Kimballa został opublikowany w 1969 r [2]. Można go uważać za graniczną wersję "asymetrycznego" modelu Hubbarda. W modelu tym zakładamy, że współczynniki przeskoku elektronów zależą od spinu. Dla zwykłego modelu Hubbarda oba współczynniki przeskoku są równe: $t_+ = t_-$. W modelu FK zakładamy, że jeden z tych współczynników (np. t_+) jest równy zero - innymi słowy, że jeden rodzaj cząstek (tu: ze spinem dodatnim) to cząstki nieruchome. Model Falicova-Kimballa jest jeszcze dalszy od rzeczywistości niż model Hubbarda (bezsponowa wersja modelu), niemniej jest ważny i stanowi istotny punkt odniesienia. Istnieją liczne związki między obydwoma modelami, np. podejrzewa się, że segregacja w modelu FK odpowiada ferromagnetyzmowi w modelu Hubbarda. Ponadto model FK jest znacznie łatwiejszy do analizy i istnieje dla niego wiele wyników zarówno ścisłych jak i numerycznych. Okazuje się, że w przypadku modelu FK fazy wstęgowe pojawiają się w szerokim zakresie parametrów.

Model FK został z powodzeniem zastosowany w układach skorelowanych elektronów. Został zaproponowany by opisać przejście metal-półprzewodnik głównie w związku SmB_6 i materiałach pokrewnych [2]. Model FK został opracowany jako model krystalizacji spowodowanej efektywnymi oddziaływaniami przez elektrony pasmowe [3, 4], model stopu dwuskładnikowego i także do opisu układów z separacją faz [5, 6, 7, 8, 9] oraz z formowaniem się wstęg [10, 11, 12].

Chociaż model FK jest prostszym modelem niż uogólniony model Hubbarda, ogólne rozwiązania nie są także znane. Możemy tutaj wspomnieć, że w modelu FK z wypełnionym do połowy pasmem wykazuje uporządkowanie dalekiego zasięgu [3, 4] w wystarczająco niskich temperaturach.

Warto podkreślić, że przy wypełnieniu połówkowym suma cząstek jest równa liczbie węzłów sieciowych, ale ilość lokalnych i wędrownych elektronów indywidualnie zależy od ich potencjałów chemicznych.

Niewiele dokładnych rozwiązań zostało uzyskanych dla układów dwuwymiarowych [13, 14]. Większość z otrzymanych rozwiązań dotyczy jedno lub ewentualnie dwuwymiarowych układów [15, 16, 17, 18, 19] lub granicy nieskończonego wymiaru [20, 21]. Natomiast większość numerycznych wyników dla modelu FK dotyczy uporządkowania w stanie podstawowym i w niskich temperaturach (patrz [22] i przytoczone tam artykuły). Wyniki, jakie możemy znaleźć dla przemian fazowych sterowanych temperaturą odnoszą się jednak do bardzo małych układów [23] lub mają wstępny charakter.

W modelu FK klasyczne "ciężkie" zlokalizowane cząstki są opisane przez liczbę obsadzeń w_x , która może przybierać dwie wartości: 0 i 1, a kwantowe wędrowne bezspinowe fermiony, opisane są przez operatory kreacji i anihilacji c_x^\dagger and c_x . Hamiltonian, określony na podzbiorze Λ sieci, jest w postaci [9]

$$H_\Lambda(\{w_x\}) = - \sum_{x,y \in \Lambda} t_{xy} c_x^\dagger c_y + U \sum_{x \in \Lambda} w_x n_x + \sum_{x \in \Lambda} \mu_+ w_x + \sum_{x \in \Lambda} \mu_- c_x^\dagger c_x. \quad (2)$$

W moich pracach habilitacyjnych stałe przeskoku t_{xy} są 10 razy mniejsze niż siła oddziaływania Coulomba. Zakładam tutaj, że wszystkie stałe przeskoku są równe t , jeżeli x, y są

najbliższymi sąsiadami (nn) i zero w przeciwnym wypadku. Ponadto μ_+ i μ_- są odpowiednio potencjałami chemicznymi ciężkich i wędronnych cząstek. Badania w mojej rozprawie habilitacyjnej dotyczą dwuwymiarowego modelu FK z połowicznym wypełnieniem.

2 Metoda Monte Carlo i algorytm Metropolis

Zastosowanie tej metody do analizy bardziej złożonego układu niż prosty model Isinga, modelu Ashkina-Tellera, została opublikowana w pracy [H1]: G. Musiał, L. Dębski, G. Kamieniarz, *Monte Carlo simulations of Ising-like phase transitions in the three-dimensional Ashkin-Teller model*, Phys. Rev. **B66**, 012407-1 – 4 (2002).

Dysponując moją wersją programu dla modelu Ashkina-Tellera w dwóch wymiarach i wykorzystując doświadczenia zdobyte przy badaniu modelu AT w dwóch i trzech wymiarach, przy wsparciu dr. hab. G. Musiała przygotowałem program i środowisko obliczeniowe. Należy tutaj nadmienić, że zaprząłem do swojego warsztatu informatycznego na potrzeby naukowe takie środowiska obliczeniowe jak LAM/MPI, OpenMPI, Condor, openMosix, które w swoim czasie umożliwiały wykonywanie obliczeń równoległych na heterogenicznych klastrach komputerów i w różnych rozproszonych środowiskach systemowych. Posługiwałem się różnymi językami programowania począwszy od języka Fortran, poprzez C a skończywszy na Javie. W późniejszym okresie korzystając z moich kontaktów w Centrum Superkomputerowym Juulich (Niemcy) przeprowadzałem obliczenia z wykorzystaniem już nie tylko samodzielnego budowanych różnego rodzaju klastrów ale również gridów, a kończąc na chmurze obliczeniowej. Wyżej wymieniony warsztat obliczeniowy został przeze mnie zbudowany i zastosowany w badaniach [H1-H4].

Dokładne rozwiązania złożonych układów w równowadze termicznej są trudne do uzyskania nawet przy zastosowaniu radykalnie uproszczonych modeli. Kolejną rzeczą jest użycie komputera do symulacji tych układów. Duża część naszej wiedzy na temat zjawisk krytycznych pochodzi całkowicie właśnie z wyników obliczeń numerycznych, które stanowią ciekawą dziedzinę wiedzy. Symulacje komputerowe zasadniczo są eksperymentami komputerowymi: w komputerze umieszczamy układ opisany przez ten sam hamiltonian co model fizyczny i następnie próbujemy obserwować jego zachowanie w równowadze termicznej.

Prawie wszystkie własności układów fizycznych w równowadze termicznej można określić obliczając wartości oczekiwane odpowiednich wielkości. Dla wielkości X , która zależy od stanu układu:

$$\langle X \rangle_p = \sum_{\alpha=1}^A X_{\alpha} p_{\alpha}. \quad (3)$$

$\langle X \rangle_p$ oznacza tutaj średnią z wartości X ze względu na rozkład p , natomiast α numeruje stany układu. A jest całkowitą liczbą takich stanów, natomiast p_{α} jest gibbsowskim prawdopodobieństwem pojawienia się stanu α w równowadze termicznej

$$p_{\alpha} = \frac{e^{-\beta E_{\alpha}}}{Z}, \quad Z \equiv \sum_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}} \quad (4)$$

gdzie Z jest sumą stanów. Rozważając dwuwymiarowy model Isinga na sieci kwadratowej, dla układu o wymiarach 3×3 , zawierającego ogółem dziewięć spinów, istnieje $A = 2^9 = 512$ możliwych konfiguracji układu. Obliczenie energii związanej z każdą konfiguracją wymaga tylko kilku operacji zmiennoprzecinkowych, więc sumowanie po 512 stanach może być wykonane w krótkim czasie. Na sieci skończonej nakładamy tutaj periodyczne warunki brzegowe. Poniżej temperatury krytycznej T_{kr} wyniki są dobre nawet dla bardzo małych sieci, ponieważ istotny wkład do sumy stanów dają konfiguracje, w których odwrócone spiny są obiektami izolowanymi. Znacznie powyżej T_{kr} klastry skorelowanych spinów są wystarczająco małe,

aby dopasować się w skończoną sieć. Niestety, dla temperatur pośrednich, wielkości fizyczne są rozmyte w szerokim zakresie temperatur. Otrzymanie konkretnych rezultatów na ich podstawie jest bardzo utrudnione.

U podłoża moich trudności tkwi powód, że liczba A konfiguracji w układzie rośnie eksponencjalnie z jego rozmiarem. Dowolny rachunek, który obejmuje wszystkie konfiguracje, bardzo szybko staje się niewykonalny. Aby uniknąć tych trudności, musiałem wykorzystać metodę, która pozwoli określić własności termodynamiczne dzięki wylosowaniu małego podzbioru ze zbioru wszystkich konfiguracji. Jedną z możliwych metod w losowaniu konfiguracji układu jest całkowicie przypadkowy wybór stanów, co oznacza, że prawdopodobieństwa wyboru dowolnych konfiguracji są sobie równe.

Taki wybór prowadzi do poważnych trudności, związanych z dużym rozrzutem statystycznym wyników, który wyraźnie je zniekształca.

Skala problemu radykalnie redukuje się przez zastosowanie losowania nieprostego (próbki ważonego). Na tym polega zastosowana metoda Monte Carlo losowania z rozkładem Gibbsa, w której liczby pseudolosowe są używane do wyboru konfiguracji układu.

Interesuje mnie otrzymanie łańcucha Markowa, w którym częstotliwość pojawienia się każdego stanu α jest proporcjonalna do związanego z nim prawdopodobieństwa p_α . Aby to zrobić, musiałem nałożyć dwa warunki na prawdopodobieństwa przejścia $P(\alpha \rightarrow \alpha')$:

- Dla danego punktu początkowego istnieje możliwość osiągnięcia przez układ dowolnej innej konfiguracji. Warunek ten często nazywany jest zasadą dostępności.
- Prawdopodobieństwa przejścia muszą podlegać mikroodwracalności lub warunkowi równowagi szczegółowej: $p_\alpha P(\alpha \rightarrow \alpha') = p_{\alpha'} P(\alpha' \rightarrow \alpha)$.

Najważniejszy algorytm dla procesu Markowa, zastosowany też w tej rozprawie, odkryli Metropolis et al. w roku 1953. Obliczam zmianę energii układu przy przejściu od konfiguracji α do α' . Gdy zmiana jest ujemna, nowa konfiguracja jest akceptowana automatycznie; gdy jest dodatnia, nowa konfiguracja jest akceptowana z prawdopodobieństwem $e^{-\beta(E_{\alpha'} - E_\alpha)}$. Zatem

$$P(\alpha \rightarrow \alpha') = \begin{cases} A^{-1}, & \text{jeżeli } E_{\alpha'} < E_\alpha \\ A^{-1}e^{-\beta(E_{\alpha'} - E_\alpha)}, & \text{jeżeli } E_{\alpha'} > E_\alpha \end{cases} \quad (5)$$

dla tych stanów α' , które można osiągnąć wychodząc z α , oraz zero dla wszystkich innych $\alpha' \neq \alpha$. A jest tutaj stałą normalizacyjną. Kryterium dostępności jest spełnione. Nowe stany są wybrane w taki sposób, że dowolną nową konfigurację α' można otrzymać z α w skończonej liczbie kroków.

Praktyczne zastosowanie algorytmu Metropolisa jest jednym z głównych powodów jego sukcesu. Wychodząc ze stanu α' , generujemy nową konfigurację α , próbując odwracania zwrotów pojedynczych spinów. Spiny wybrane są przypadkowo lub są odwracane po kolei. Następnie porównuję energię starej i nowej konfiguracji. Na końcu używam liczby pseudolosowej, aby zaakceptować lub odrzucić ruch z prawdopodobieństwem danym przez wzór (5). Algorytm Metropolisa możemy zatem przedstawić następująco:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Dla każdego} \\ \text{stopnia swobody} \\ s_i \text{ i } \sigma_i \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{Otrzymaj nową konfigurację ("spin-flip")} \\ \text{Oblicz zmianę energii } E_{\alpha'} - E_\alpha \\ \text{Oblicz } \mathcal{P} = \min(1, e^{-\beta(E_{\alpha'} - E_\alpha)}) \\ \text{Wylosuj zmienną } r \text{ z przedziału } [0, 1] \\ \text{Zaakceptuj ruch, jeśli } r \leq \mathcal{P} \end{array}$$

W rozpatrywanych układach stosuję periodyczne warunki brzegowe. Gdy każdy spin w naszej próbce został raz poddany próbie odwrócenia mówimy o wykonaniu jednego kroku w

Dobry

metodzie Monte Carlo.

W symulacjach Monte Carlo ważną rolę odgrywa wybór generatora liczb pseudolosowych. Użycie nieodpowiedniego generatora liczb może prowadzić do systematycznych błędów w wynikach symulacji. Okres powtórzeń 32-bitowego generatora liczb losowych wynoszący $2^{32} \approx 4,3 \cdot 10^9$ jest zbyt mały. Dlatego w moich symulacjach używałem głównie 64-bitowego generatora tych liczb, a także we wcześniejszych pracach 48-bitowego generatora, co jest optymalną sytuacją w symulacjach Monte Carlo.

Najpierw doprowadzamy układ do stanu równowagi termicznej przez wykonanie odpowiedniej liczby kroków Monte Carlo, co nazywa się wygrzewaniem. Niezbędną ilość kroków w trakcie wygrzewania przy danej wielkości próbki L ustalałem podczas testowania programu.

Obliczenie średnich temperaturowych wielkości fizycznych na podstawie wylosowanych N_{konf} konfiguracji układu w trakcie symulacji wykonuje się na podstawie i średnich cząstkowych wyznaczonych z N_{cz} konfiguracji (zatem $N_{\text{konf}} = i N_{\text{cz}}$), żeby uzyskać miarę rozrzutu statystycznego wyników.

W moich symulacjach [H2 – H4] rozpatrywałem próbki o rozmiarze $L \times L \leq 100$. Stosowałem wygrzewanie o długości rzędu $10^5 - 10^6$ kroków Monte Carlo, zależnie od wartości L . Jeden przebieg programu składa się z obliczenia od 6 do 40 średnich cząstkowych, z których każda jest obliczana na podstawie około 10^7 kroków Monte Carlo, ale tylko co k -ty krok dawał wkład do obliczenia wielkości fizycznych ($6 \leq k \leq 10$), aby uniknąć korelacji między losowanymi konfiguracjami układu. Czas przebiegu programu wynosił od kilku godzin dla małych próbek ($L < 16$) do wielu tygodni dla największych układów.

Czas obliczeń dla dużych układów skracałem poprzez zrównoleżenie przetwarzania. Równoległe procesy obliczały swoją część średnich cząstkowych, oczywiście wykorzystując różne sekwencje liczb pseudolosowych. W celu otrzymania diagramu fazowego potrzeba było wykonać dziesiątki tysięcy obliczeń numerycznych.

3 Metoda badawcza

3.1 Transformacja do stopni swobody typu Isinga

Najważniejsza część tej metody przedstawiona została w pracy [H2]: J. Wojtkiewicz, G. Musiał, L. Dębski, *A Monte Carlo study of the spinless Falicov-Kimball model in the perturbative regime: preliminary results*, phys. stat. sol. c3, 199 - 203, (2006)

Ponieważ, jak wskazałem w pracy [H2] i w części 1.2 tego opracowania, dotychczas w literaturze przedmiotu dla dwuwymiarowego modelu FK zostały otrzymane wyniki tylko w stanie podstawowym, a w skończonych temperaturach tylko dla bardzo małych układów, podjąłem próbę jednoznacznej weryfikacji istnienia faz wstęgowych w skończonych temperaturach w odniesieniu do układu z wypełnieniem połówkowym. Wykorzystując relację $s_i = w_i - 1/2$ mogę transformować układ do stopni swobody s typu Isinga. Po tej transformacji otrzymuję znany model Isinga w polu magnetycznym. Dlatego stosunkowo prostymi środkami udało mi się potwierdzić istnienie fazy typu szachownica w skończonych temperaturach, ale równie ważne było zweryfikowanie poprawności działania mojego programu komputerowego. W pracy [H2] dla celów testowych wykorzystałem Hamiltonian w drugim rzędzie rachunku zaburzeń [24].

$$H_{\text{eff}}^{(2)} = h \sum_i s_i + 2 \frac{t^2}{U} \sum_{d(i,j)=1} s_i s_j \quad (6)$$

Zasadnicze fizyczne wyniki mojej rozprawy habilitacyjnej dotyczą użycia dużo bardziej realistycznego rozwinięcia w czwartym rzędzie rachunku zaburzeń [24].

$$\begin{aligned}
H_{\text{eff}}^{(4)} = & h \sum_i s_i + \left(2 \frac{t^2}{U} - 18 \frac{t^4}{U^3} \right) \sum_{d(i,j)=1} s_i s_j \\
& + \frac{6t^4}{U^3} \sum_{d(i,j)=\sqrt{2}} s_i s_j + \frac{4t^4}{U^3} \sum_{d(i,j)=2} s_i s_j \\
& + \frac{40t^4}{U^3} \sum_{\mathcal{P}_{4,ijkl}} s_i s_j s_k s_l + \frac{3t^4}{2U^3} \sum_{\mathcal{P}_{4,ijkl}} 1
\end{aligned} \tag{7}$$

gdzie $d(i, j)$ oznacza odległość oddziaływania w układzie między stopniami swobody s na węzłach i i j . $\mathcal{P}_{4,ijkl}$ jest kwadratem rozpiętym na węzłach i, j, k, l .

Po tej transformacji również otrzymałem układ ze stopniami swobody s typu Isinga, ale z obecnością pięciu konkurencyjnych członów oddziaływujących antyferromagnetycznie na różnych odległościach, co prowadzi do skomplikowanej frustracji, ale otrzymanie jednoznacznych wyników było możliwe.

W pracy H1 wypracowałem program, a w kolejnych pracach [H2-H4] wykorzystałem go by otrzymać wiarygodne wyniki przy transformacji modelu FK do stopni swobody typu Isinga.

3.2 Eksperyment komputerowy typu Monte Carlo

Zbudowany przeze mnie eksperyment komputerowy typu Monte Carlo w szczegółach przedstawiłem w pracy [H4]: **L. Dębski**, *The possibility of detection of finite temperature stripe ordering in 2D spinless Falicov-Kimball model*, Phase Transitions 89, 249 - 260 (2016)

Używając kumulanty Bindera w postaci $Q_L = \langle M^2 \rangle_L^2 / \langle M^4 \rangle_L$ [25, 26] gdzie $\langle M^n \rangle_L$ oznacza n -ty moment parametru porządku uśredniony po zespole niezależnych próbek wielkości $L \times L$. W fazie paramagnetycznej dla $T > T_c$ i $L \gg \xi$, gdzie ξ oznacza długość korelacji, Q_L dąży do $\frac{1}{3}$. To odpowiada rozkładowi Gaussa. Jednakże, w fazie uporządkowanej dla $T < T_c$ i $L \gg \xi$, Q_L dąży do 1.

Dla $L \ll \xi$, pojawia się wspólny punkt przecięcia krzywych $Q_L(T)$ dla różnych rozmiarów L , który powinien być identyfikowany z punktem przejścia fazowego. Kumulantę Bindera Q_L w zależności od $k_B T$ przedstawiono w pracy H4, która z wartości 1 w niskich temperaturach zmniejsza się do wartości $1/3$, a następnie powoli podnosi się, kiedy pole h jest niezerowe.

Metoda w całej swojej złożoności została użyta przeze mnie do badania zachowania modelu Ashkina-Tellera. Warto zauważyć, że nawet obecność tylko dwóch konkurencyjnych członów w Hamiltonianie może powodować znaczne oscylacje w otrzymanych krzywych w tak zwanym regionie faz mieszanych w trójwymiarowym modelu AT, w którym te dwa człony wnoszą porównywalny wkład [27]. Wprawdzie, ze względu na większą liczbę członów w moim hamiltonianie, chaotyczne oscylacje są znacznie większe, to jednak możliwa jest analiza ilościowa wyników.

Warto zauważyć, że tylko przy $h = 0$, jedno z podstawowych narzędzi badawczych w tej rozprawie, kumulanta Bindera $Q_L(k_B T)$, dąży do $1/3$ w fazie nieuporządkowanej i do 1 w fazie uporządkowanej. Jednak dla niezerowych wartości h po obniżeniu wartości Q_L w okolice $1/3$, kiedy przechodzimy od fazy uporządkowanej w kierunku fazy nieuporządkowanej, zaobserwujemy stopniowy wzrost wartości Q_L , która jest efektem uporządkowania pochodzącego z obecności pola h . Wzrost ten jest szybszy dla większych wartości h .

Podobnie zachowuje się drugie moje narzędzie badawcze, namagnesowanie $M_L(k_B T)$. Obserwujemy spadek wartości M_L z (około) 1 w okolice 0 wraz ze wzrostem temperatury tylko dla $h = 0$. Ale dla wartości h większych niż 0, po spadku M_L w obszarze krytycznym,

obserwujemy jego powolny wzrost przy wyższych temperaturach, co jest efektem wpływu pola h .

Jednak w kluczowym obszarze wartości h od 0,4 do 0,6 obserwujemy znaczne wahania tych krzywych. Są one konsekwencją obecności aż pięciu wielu konkurujących członów w hamiltonianie (7), które wnoszą porównywalny wkład w tym obszarze diagramu fazowego.

Pomimo obecności tych oscylacji, analiza ilościowa jest możliwa, jako że wartości kumulanty Bindera są wyraźnie wyższe w uporządkowanym obszarze niż w nieuporządkowanym. W obszarze przejściowym z fazy uporządkowanej do nieuporządkowanej wartość kumulanty Bindera Q_L znacznie maleje. Pozwala to na jednoznaczną identyfikację wykrycie przejścia fazowego, chociaż obecność tych oscylacji zmniejsza dokładność jego lokalizacji.

Oprócz podziału układu na dwie podsieci, równocześnie otrzymałem wyniki dla układu podzielonego na trzy podsieci. W ten sposób możliwe jest wykrywanie bezpośrednio obecności faz (1) i (2) zilustrowanych na rys. 1 w pracy H3 w stanie podstawowym. W tym celu ważne jest, aby mieć rozmiar układu L podzielny przez 3, ale nie podzielny przez 2 podczas sprawdzania obecności fazy (2), i w ten sposób można wykorzystać periodyczne warunki brzegowe w naszych eksperymencie komputerowym. Również z tego powodu powinniśmy brać parzysty rozmiar L podczas sprawdzania obecności fazy (1).

Ponadto częściowe uporządkowanie zostanie wykryte w układzie z parzystym L , co pozwala nam stwierdzić pośrednio obecność fazy (3). Podobna sytuacja pojawia się gdy L jest podzielne przez 3, wtedy częściowe uporządkowanie powinno zostać wykryte, gdy pojawia się faza (4). Zatem, porównując wyniki z układu podzielonego na dwie i trzy podsieci i obserwując częściowe uporządkowanie, można pośrednio wywnioskować o obecności fazy (3) i (4). Tak więc analizując zachowanie zależności obliczonej kumulanty Bindera Q_L od temperatury, jesteśmy w stanie wykryć przemiany między fazami (0), (1) i (2) a pośrednio obecność faz (3) i (4).

W tym artykule zaprezentowałem możliwości wykrywania faz wstępowych w skończonych temperaturach w dwuwymiarowym modelu Falicova-Kimballa z połowicznym wypełnieniem za pomocą niniejszego eksperymentu Monte Carlo. Praca objaśnia również narzędzia, które pozwoliły na wykrycie granic fazowych w skończonych temperaturach w 2-im i 4-tym rzędzie rachunku zaburzeń. Analizy zależności kumulanty Bindera i profili namagnesowania od temperatury dla dwóch i trzech podsieci, z parzystymi i nieparzystymi rozmiarami układu, nie tylko rozszerzyły wnioski z moich wstępnych wyników, ale również pozwoliły mi zwiększyć dokładność analiz.

Istnieją także algorytmy, które odwracają całe klastry spinów, prowadzącą one jednak do znacznego zmniejszenia (lub eliminacji) krytycznego spowolnienia [28].

4 Diagram fazowy w skończonych temperaturach i fazy wstępowe

Analizy i pełny diagram fazowy w skończonych temperaturach z obecnością faz wstępowych zostały opublikowane w pracy [H3]: **L. Dębski**, *2D Falicov-Kimball model in the perturbative regime at finite-temperatures*, Acta Physica Polonica **A115**, 156 (2009)

W przedziale wartości h od 0 do 0,4, obserwujemy przejście fazowe tylko pomiędzy fazą uporządkowaną (1) typu szachownicy a faza homogeniczną (0) czyli nieuporządkowaną. Z mojej pracy [29] wiemy, że w tym przedziale krzywe $Q_L(T)$ mają gładki przebieg z czytelnymi przecięciami w rejonie krytycznym dla różnych rozmiarów L układu. Miejsca tych przecięć wyznaczają granice faz. Wniosek ten potwierdzają profile namagnesowania z podsieci [H4,[29]].

Przebieg zależności $Q_L(T)$ i $M_L(T)$ ulega zasadniczej zmianie i komplikuje się, gdy przesuwamy się w kierunku większych wartości h .

Tutaj porównywalny wkład zaczynają wносить wszystkie spośród pięciu członów hamiltonianu. Zauważmy, że każdy z tych członów ma dodatni współczynnik w zakresie rozpatrywanych tutaj wartości parametrów. W języku oddziaływań isingowskich stopni swobody s_i oznacza to forsowanie uporządkowania antyferromagnetycznego pomiędzy bliższymi i dalszymi sąsiadami, co nieuchronnie prowadzi do zachowań typu frustracji i nieregularnego przebiegu krzywych $Q_L(T)$ i $M_L(T)$.

W konsekwencji w obszarze wartości h od 0,4 do 0,58 obserwujemy różnorodność i dynamiczne zmiany faz wstęgowych. Jest to najbardziej ciekawy, a zarazem trudny obszar w identyfikacji i określeniu granic poszczególnych przejść fazowych. Przeglądając zależności $Q_L(T)$ i $M_L(T)$ dla kolejnych wartości h przy podziale na dwie oraz trzy podsieci, jak klatki filmu, na diagramie fazowym obserwujemy istotne zmiany w ich przebiegu. Dzięki temu możemy wprost wnioskować o uporządkowaniu i granicach fazowych w odniesieniu do faz (0), (1), (2).

Ponadto, częściowy porządek w zachowaniu zależności $Q_L(T)$ i $M_L(T)$ będzie obserwowany przy podziale na dwie podsieci (L parzyste ze względu na okresowe warunki brzegowe) gdy w układzie wystąpi faza (3). Podobnie częściowy porządek zostanie odnotowany przy podziale na trzy podsieci (L podzielne przez 3) gdy w układzie pojawi się faza (4). Pozwala to nam pośrednio wnioskować o wystąpieniu faz (3) i (4).

Warto przypomnieć, że duża wartość namagnesowania czyli średnia wartość spinu s_i na podsieci oznacza dużą wartość liczby obsadzeń w_i ciężkich cząstek. Jak wspomnieliśmy wyżej forsowanie tego samego uporządkowania pomiędzy bliższymi i dalszymi sąsiadami prowadzi do frustracji objawiającej się pewnym chaosem w przebiegu krzywych $Q_L(T)$ i $M_L(T)$, co istotnie komplikuje analizy, ale dzięki łącznemu użyciu narzędzi przedstawionych w pracy [H4] i w części 3.2 tego opracowania, mogą jednoznacznie potwierdzić istnienie faz wstęgowych w dwuwymiarowym modelu FK w skończonych temperaturach, co jest wynikiem nowym w literaturze przedmiotu. Wiarygodność otrzymanych przeze mnie wyników podnosi fakt, że wyznaczone przeze mnie linie przemian fazowych dla temperatury zmierzającej do zera jednoznacznie potwierdzają granice pomiędzy tymi fazami wyznaczone analitycznie w stanie podstawowym [24].

5 Podsumowanie

Wyniki otrzymane przy pomocy mojej metody [H4, [29]] dla dwuwymiarowego modelu FK przy połówkowym wypełnieniu zostały podsumowane w pracy H3, która przedstawia diagram fazowy jako zależność $k_B T$ od h różnicy potencjałów chemicznych ciężkich μ_+ i lekkich μ_- cząstek, w szerokim zakresie temperatur. Na rysunku w pracy H3 widzimy przebieg granic poszczególnych faz wstęgowych wyznaczonych w tej pracy. Wyniki naszych obliczeń pozwoliły wprost określić granice faz (0), (1), (2). Jednak pośrednio mogłem wnioskować również o przebiegu granic faz (3) i (4).

Warto podkreślić, że wyznaczone analitycznie granice faz (dla temperatury $T=0$ [24]) zostały tutaj potwierdzone numerycznie przez zastosowanie mojej nowej metody analityczno-obliczeniowej [H4, [29]].

Na diagramie w pracy [H3] występują wszystkie fazy wstęgowe od (0) do (4) zilustrowanych na rys. 1 w pracy H3 w stanie podstawowym. Analiza wyników moich obliczeń pozwoliła wyznaczyć trzy punkty bifurkacji granic fazowych. Pierwszy punkt bifurkacji kończy linię przemian między fazą (0) i (1) przy $h = 0,40(2)$ dla temperatury $k_B T = 0,18(2)$. Ta linia graniczna rozdwaja się i w tym obszarze pojawia się faza (3). Drugi punkt bifurkacji kończy

linię przemian między fazami (1) i (3), przy $h = 0,41(2)$ dla temperatury $k_B T = 0,07(3)$. Linia ta rozdwaja się i w tym obszarze pojawia się faza (2). Trzeci punkt bifurkacji kończy linię przemian między fazami (0) i (3) w punkcie $h = 0,05(2)$ dla temperatury $k_B T = 0,06(2)$. Linia ta rozdwaja się i w tym obszarze pojawia się faza (4).

Możemy również zauważyć, że kiedy maleje ilość ciężkich cząstek (wyższe wartości h), kolejne fazy wstępowe (2), (3) i (4) pojawiają się przy niższych temperaturach.

Podsumowując, należy stwierdzić, że istnienie faz wstępowych w skończonych temperaturach dla dwuwymiarowego modelu Falicova-Kimballa z połowicznym wypełnieniem zostało jednoznacznie potwierdzone. Otrzymane wyniki wskazują na ciągły charakter wszystkich przejść fazowych. Symulacje Monte Carlo z użyciem takich narzędzi jak kumulanta Bindera i profile namagnesowania z powodzeniem mogą być zastosowane do wyznaczenia punktów i charakteru przemian fazowych [29], w złożonych układach z obecnością wielu konkurencyjnych członów w hamiltonianie, jak w dwuwymiarowym modelu FK przetransformowanym do stopni swobody typu Isinga.

6 Perspektywa dalszych badań

Krótko przedstawię jeszcze perspektywę dalszych badań, głównie na bazie skonstruowanego przeze mnie algorytmu:

- a) Przeprowadzenie obliczeń numerycznych dla modelu FK w skończonych temperaturach w trzech wymiarach;
- b) Wykorzystanie transformacji Suzuki-Trottera i metody Monte Carlo do badania magnetyzmu molekularnego;
- c) Uwzględnienie w mojej metodzie bezpośredniego badania faz (3) i (4);
- d) Przygotowanie zrównoleglonej wersji mojego programu, by mogła obliczać jedną średnią cząstkową przez wiele równoległych procesów dzięki wykorzystaniu biblioteki MPI z jednostronną komunikacją i umieszczeniu spinów granicznych w obszarze wspólnym [30]. Pozwoli to rozpatrywać układy o znacznie większych rozmiarach, co istnieje poprawi jakość analiz.

Literatura

- [1] Hubbard J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. Proceedings Royal Society London A. 1963;276:238-257; Hubbard J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. III. An Improved Solution. Proceedings Royal Society London A. 1964;281:401-419.
- [2] Falicov LM, Kimball JC. Simple Model for Semiconductor-Metal Transitions: $S_m B_6$ and Transition-Metal Oxides. Physical Review Letters. 1969;22:997-998.
- [3] Kennedy T, Lieb E. An itinerant electron model with crystalline or magnetic long range order. Physica A. 1986;138:320-358.
- [4] Lieb EH. A model for crystallization: A variation on the Hubbard model. Physica A. 1986;140:240-250.
- [5] Freericks JK, Lemański R. Segregation and charge-density-wave order in the spinless Falicov-Kimball model. Physical Review B. 2000;61:13438-13444.

- [6] Freericks JK, Lieb EH, Ueltschi D. Phase Separation due to Quantum Mechanical Correlations. *Physical Review Letters*. 2002;88:106401.
- [7] Letfulov BM, Freericks JK. Phase separation in the combined Falicov-Kimball and static Holstein model. *Physical Review B*. 2002;66:033102.
- [8] Fárkasovský P. Phase separation and metal-insulator transitions in the spin-1/2 Falicov-Kimball model. *Physical Review B*. 2000;60:10776-10781.
- [9] Freericks JK, Gruber Ch, Macris N. Phase separation and the segregation principle in the infinite-U spinless Falicov-Kimball model. *Physical Review B*. 1999;60:1617-1626; Freericks JK, Gruber Ch, Macris N. Phase separation in the binary-alloy problem: The one-dimensional spinless Falicov-Kimball model. 1996;53:16189-16196.
- [10] Lemański R, Freericks JK, Banach G. Stripe Phases in the Two-Dimensional Falicov-Kimball Model. *Physical Review Letters*. 2002;89:196403-196800.
- [11] Lemański R, Freericks JK, Banach G. Charge stripes due to electron correlations in the two-dimensional spinless Falicov-Kimball model. *Journal of Statistical Physics*. 2004;116:699-718.
- [12] Haller K, Kennedy T. Periodic Ground States in the Neutral Falicov-Kimball Model in Two Dimensions. *Journal of Statistical Physics*. 2001;102:15-34.
- [13] Watson GI, Lemański R. The ground-state phase diagram of the two-dimensional Falicov-Kimball model. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 1995;7:9521.
- [14] de Vries P, Michielsen K, de Raedt H. The simplified Hubbard model in one and two dimensions-Thermodynamic and dynamic properties. *Zeitschrift für Physik B*. 1993;92:353-362.
- [15] Freericks JK, Falicov LM. Two-state one-dimensional spinless Fermi gas. *Physical Review B*. 1990;41:2163-2172.
- [16] Freericks JK. Spinless Falicov-Kimball model (annealed binary alloy) from large to small dimensions. *Physical Review B*. 1993;47:9263-9272.
- [17] Gruber Ch, Ueltschi D, Jedrzejewski J. Molecule formation and the Farey tree in the one-dimensional Falicov-Kimball model. *Journal of Statistical Physics*. 1994;76:125-157.
- [18] Lyzwa R. The one-dimensional spinless Falicov-Kimball model with periodic configurations of localized electrons. *Physica A*. 1993;192:231-248.
- [19] Kennedy T. Some rigorous results on the ground states of the Falicov-Kimball model. *Reviews in Mathematical Physics*. 1994;6:901-925.
- [20] Brandt U, Mielsch C. Thermodynamics and correlation functions of the Falicov-Kimball model in large dimensions. *Zeitschrift für Physik B: Condensed Matter*. 1989;75:365-370; Brandt U, Mielsch C. Thermodynamics of the Falicov-Kimball model in large dimensions II. *Zeitschrift für Physik B: Condensed Matter*. 1990;79:295-299; Brandt U, Mielsch C. Free energy of the Falicov-Kimball model in large dimensions. *Zeitschrift für Physik B: Condensed Matter*. 1991;82:37-41.
- [21] van Dongen PGJ, Vollhardt D. Exact mean-field Hamiltonian for fermionic lattice models in high dimensions. *Physical Review Letters*. 1990;65:1663-1666.

- [22] Datta N, Fernandez R, Fröhlich J. Effective Hamiltonians and phase diagrams for tight-binding model. *Journal of Statistical Physics*. 1999;96:545-611.
- [23] Maška M, Czajka K. Thermodynamics of the two-dimensional Falicov-Kimball model: A classical Monte Carlo study. *Physical Review B*. 2006;74:035109. at finite temperatures. *Acta Physica Polonica A*. 2009;115:156-158.
- [24] Wojtkiewicz J, Lemański R. Ground states of the Falicov-Kimball model with correlated hopping. *Physical Review B*. 2001;64:233103.
- [25] Musiał G, Dębski L, Kamieniarz G. Monte Carlo simulations of Ising-like phase transitions in the three-dimensional Ashkin-Teller model. *Physical Review B*. 2002;66:012407.
- [26] Binder K, Heermann DW. *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction*. Springer Berlin. 1988:1-127.
- [27] Musiał G, Rogiers J. On the possibility of nonuniversal behavior in 3D Ashkin-Teller model. *Physica Status Solidi (b)*. 2006;243:335-338.
- [28] Swendsen R. H. , Wang J.-S. Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations. *Phys. Rev. Lett.* 1987;58:86.
- [29] Dębski L. The possibility of detection of finite temperature stripe ordering in 2D spinless Falicov-Kimball model. *Phase Transitions* 2016;89:249 - 260
- [30] Murawski S., Musiał G., Pawłowski G. Parallel MC simulations for spin models with distributed lattice, *LNCS* 2016;9574:332-341

Publikacje naukowe w czasopismach znajdujących się w bazie JCR bez prac wchodzących w skład rozprawy habilitacyjnej

1. G. Kamieniarz, G. Musiał, L. Dębski, M. Bieliński and R. Dekeyser, *Quantum effects and critical behaviour in low-dimensional spin-1/2 systems*, Acta Physica Polon. A92, 445 - 447 (1997)
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu części obliczeń numerycznych i analizie tych wyników. Mój udział procentowy szacuję na 20%
2. P. Pawlicki, G. Kamieniarz and L. Dębski, *Monte Carlo analysis of the extended Ashkin-Teller model*, Physica A242, 290 (1997)
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu obliczeń numerycznych, współanalizowaniu wyników, wykonaniu rysunków. Mój udział procentowy szacuję na 40%
3. G. Kamieniarz, R. Dekeyser, G. Musiał, L. Dębski and M. Bieliński, *Modified effective-field approach to low-dimensional spin-1/2 Systems*, Phys. Rev. E56, 144 - 150 (1997)
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na na wykonaniu części obliczeń numerycznych i analizie tych wyników. Mój udział procentowy szacuję na 20%
4. L. Dębski, *Monte Carlo Simulations of the Ashkin-Teller Model*, Acta Phys. Pol. A97, 859 (2000)
Mój udział procentowy szacuję na 100%
5. G. Musiał, L. Dębski, G. Kamieniarz, *Monte Carlo simulations of phase transitions in the three-dimensional Ashkin-Teller Model*, Acta Physica Polonica B32 3439 - 3444 (2001)
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu części obliczeń, dyskusji wyników, wykonaniu rysunków, współredagowaniu publikacji. Mój udział procentowy szacuję na 48%
6. S. Bucikiewicz, L. Dębski, W. Florek, *Application of algebraic combinatorics to finite spin systems with dihedral symmetry*, Acta Physica Polonica A100, 453 (2001)
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu obliczeń numerycznych i analizie tych wyników. Mój udział procentowy szacuję na 20%
7. G. Musiał, L. Dębski, *Monte Carlo method with parallel computation of phase transitions in the three-dimensional Ashkin-Teller Model*, Lect. Notes in Comp. Sci. 2328 (Springer series), 535-543 (2002)
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu części obliczeń numerycznych i ich analiz, dyskusji wyników, wykonaniu rysunków, współredagowaniu publikacji, utworzenia klastra obliczeniowego. Mój udział procentowy szacuję na 50%
8. G. Musiał, L. Dębski, G. Kamieniarz, *Monte Carlo simulations of the 3D Ashkin-Teller Model: continuous phase transition lines*, phys. stat. sol. (b) 236, 441 - 444 (2003)
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu części obliczeń numerycznych i ich analiz, dyskusji wyników, wykonaniu rysunków, współredagowaniu publikacji. Mój udział procentowy szacuję na 48%



9. L. Dębski, G. Musiał, J. Rogiers, *A Monte Carlo study of continuous non-Ising phase transitions in the 3D Ashkin-Teller Model using the OpenMosix cluster of linux PCs*, Lect. Notes in Comp. Sci. 3019 (springer series), 455 - 460 (2004)

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu części obliczeń numerycznych i ich analiz, dyskusji wyników, wykonaniu rysunków, współredagowaniu publikacji, zbudowaniu klastra obliczeniowego. Mój udział procentowy szacuję na 55%

10. G. Musiał, L. Dębski, J. Wojtkiewicz, *A Monte Carlo study of the Falicov-Kimball model in the perturbative regime*, Low Temp. Phys. 33, 797 - 799 (2007)

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu części obliczeń numerycznych i ich analiz, dyskusji wyników, wykonaniu rysunków, współredagowaniu publikacji, postawieniu problemu fizycznego, napisania programu komputerowego. Mój udział procentowy szacuję na 80%

11. G. Musiał, L. Dębski, D. Jeziorek-Knioła, K. Gołąb, *A self-scheduling scheme for parallel processing in heterogeneous environment: simulations of the Monte Carlo type*, Lect. Notes in Comp. Sci. 4967, pp. 429-438, (2008)

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu części obliczeń numerycznych i ich analiz na zbudowanym przeze mnie środowisku rozproszonym. Mój udział procentowy szacuję na 25%

12. D. Jeziorek-Knioła, G. Musiał, L. Dębski, J. Rogiers, S. Dylak, *On non-Ising phase transitions in the 3D standard Ashkin-Teller model*, Acta Phys. Polon. A 121, 1105-1107 (2012)

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu części obliczeń numerycznych i ich analiz, współredagowaniu publikacji. Mój udział procentowy szacuję na 30%

Publikacje naukowe w czasopismach innych niż znajdujące się w bazie JCR

1. G. Kamieniarz, G. Musiał, L. Dębski, M. Bieliński and R. Dekeyser, *Simulations of the low-dimensional Ising and Heisenberg models*, Proceedings of the 8th International Conference "Physics Computing'96" (Kraków, 09.17 - 21, 1996), pp. 343-46 Eds. P. Borchers, M. Bubak, A. Maksymowicz; Academic Computer Centre
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu części obliczeń numerycznych i analizie tych wyników. Mój udział procentowy szacuję na 20%
2. G. Kamieniarz, P. Pawlicki, L. Dębski, H.W.J. Blöte, *Monte Carlo simulations of critical properties of classical Ising-like models*, Acta Magnetica XI, 81 (1997)
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu części obliczeń numerycznych i ich analiz, dyskusji wyników, wykonaniu rysunków, współredagowaniu publikacji. Mój udział procentowy szacuję na 45%
3. L. Debski, G. Kamieniarz, *Visualization of Monte Carlo spin clusters for the Ising model in 2 dimension*, Comp. Meth. Scie. Techn. 4, 71 (1998)
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na napisaniu programu w Javie, wykonaniu rysunków, napisaniu publikacji, dyskusji nad wynikami. Mój udział procentowy szacuję na 90%
4. G. Kamieniarz, L. Dębski, *Phase diagram of the Ashkin-Teller model*, Proc. of 11th International Seminar on Phase Transitions and Critical Phenomena, Wrocław, Polanica Zdrój, 05.4-7, 1998, ser. Phys. Chem. Sol., ed. M. Kazimierski, Wrocław 1998, pp. 77-79
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu części obliczeń numerycznych i ich analiz, dyskusji wyników, wykonaniu rysunków, współredagowaniu publikacji. Mój udział procentowy szacuję na 90%
5. G. Kamieniarz, G. Musiał, L. Dębski, M. Bieliński, R. Dekeyser, *Effective-field ideas and simulations of phase transitions in lattice-spin systems*, Proc. of 11th International Seminar on Phase Transitions and Critical Phenomena, Wrocław, Polanica Zdrój, 05.4-7, 1998, ser. Phys. Chem. Sol., ed. M. Kazimierski, Wrocław 1998, pp. 126-130
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu części obliczeń numerycznych i analizie tych wyników. Mój udział procentowy szacuję na 20%
6. G. Musiał, L. Dębski, G. Kamieniarz, *Application of computer simulations to phase transitions in the Ashkin-Teller model*, Proc. of SGI Users' Conference, Kraków, 10.11-14, 2000, Ed. M. Bubak, J. Mościński and M. Noga, ACC CYFRONET AGH, Kraków 2000, pp. 392 - 399
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu części obliczeń numerycznych i ich analiz, dyskusji wyników, współredagowaniu publikacji. Mój udział procentowy szacuję na 45%
7. G. Musiał, L. Dębski, G. Kamieniarz, J. Rogiers, *Application of computer simulations to investigation of phase transitions in the Ashkin-Teller model*, Comp. Meth. Scien. Techn. 7 (1), 67 - 82 (2001)

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu części obliczeń numerycznych i ich analiz, dyskusji wyników, współredagowaniu publikacji. Mój udział procentowy szacuję na 45%

8. G. Musiał, L. Dębski, G. Kamieniarz, *Parallel simulations of the Monte Carlo type: 3D Ashkin-Teller Model*, Comput. Meth. Scie. Techn. 13 41 - 46 (2007)

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na napisaniu programu zrównoleżonego, wykonaniu części obliczeń numerycznych i ich analiz, budowaie środowiska obliczeniowego, dyskusji wyników, współredagowaniu publikacji. Mój udział procentowy szacuję na 48%

9. G. Musiał, L. Dębski, *Parallelization of simulations of the Monte Carlo type: 3D Ashkin-Teller Model*, in "Distributed Computing and Grid-technologies in Science and Education", Proceedings of Second International Conference (Dubna, June 26 - 30, 2006) Dubna: JINR, 2006, D11-2006-167, p. 119

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na napisaniu programu zrównoleżonego, wykonaniu części obliczeń numerycznych i ich analiz, zbudowaniu środowiska obliczeniowego, dyskusji wyników, współredagowaniu publikacji. Mój udział procentowy szacuję na 50%



**Sumaryczny impact factor według listy JCR
zgodnie z rokiem opublikowania - 14,258**

**Liczba cytowań publikacji według bazy Web od Science:
52**

Indeks Hirscha według bazy Web of Science: 4

Udział w międzynarodowych i krajowych projektach badawczych

1. Projekt polsko-flamandzki *Quantum effects and phase transitions in low dimensional systems*, 1995 – 2000, wykonawca;
2. Grant KBN nr 2 P302 116 06 *Teoretyczne aspekty magnetyzmu w układach niskowymiarowych: efekty kwantowe, przejścia fazowe i symulacje komputerowe*, 01.01.1994 – 31.12.1996, wykonawca;
3. Grant KBN nr 8 T11F 015 09 *Symulacje magnetyków niskowymiarowych, mezoskopowych i wielowarstwowych*, 01.07.1995 – 30.06.1998, wykonawca;
4. Europejska sieć doskonałości MAGMANet *Molecular Approach to Nanomagnets and Multifunctional Materials*, 01.05.2005 – 30.04.2009, wykonawca;
5. *Diagram fazowy modelu Askina-Tellera w trzech wymiarach*, KBN, (promotorski), 01.07.1998-30.06.2000;
6. Projekt interdyscyplinarny z AM, nr PU-II/15: *Komputerowa ocena koordynacji wzrokowo-ruchowej u dzieci z upośledzeniem umysłowym w stopniu lekkim: próba wdrożenia jako prostego testu przesiewowego*, wykonawca;
7. Grant KBN nr 8 T11F 027 16: *Symulacje efektów kwantowych w magnetykach mezoskopowych i niskowymiarowych oraz rozwój oprogramowania*, wykonawca;
8. Grant KBN nr 2 P03B 074 19: *Badanie mezoskopowych układów spinowych ($s=1, 3/2, 5/2$) z izotropowym oddziaływaniem antyferromagnetycznym*, wykonawca;
9. SIMPOL MERG-CT-2004 Contract No. 6348 Europejski grant reintegracyjny Marie Curie, 2005-2006, wykonawca;
10. Projekt współfinansowany przez UE, MEIN 24/6. PR UE/2006/7, KBN, 2006-03.2008, (wykonawca projektu i koordynator;)
11. Projekt współfinansowany przez UE, POIG.02.03.02-00-044/09, (BioInfoBank), 01.07.2009 - 30.06.2011, projekt objęty patronatem Pani Profesor Barbary Kudryckiej - Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego, Wirtualna Akademia Bioinformatyki, wykonawca;
12. Projekt współfinansowany przez UE, Laureat programu operacyjnego Kapitał Ludzki *Proinnowacyjne Kształcenie, Kompetentna Kadra, Absolwenci Przyszłości*, zintegrowany program wspierający rozwój uniwersytetu im. A. Mickiewicza w Poznaniu, 2009-2014;

13. Projekt współfinansowany przez UE, projekt: *Z Fizyką, Matematyką i Przedsiębiorczością zdobywamy Świat!!!*, nr projektu WND-POKL.03.03.04-00-118/09 (POKL 3.3.4), 2009-2012, koordynator projektu na województwo wielkopolskie;
14. Projekt współfinansowany przez UE, projekt: *AS KOMPETENCJI*, nr projektu WND-POKL.03.03.04-00-109/09 (POKL 3.3.4), 2009-2012, koordynator projektu na województwo wielkopolskie;
15. Projekt współfinansowany przez UE, projekt: *FORESIGHT- narzędzie wspierające transfer wiedzy między nauką a przedsiębiorstwami*, nr projektu POKL.08.02.01-30-010/11, 2011-2012, wykonawca;

Yosh

Międzynarodowe i krajowe nagrody za działalność naukową

- Zespołowa nagroda Rektora UAM 2 stopnia z dnia 01.10.1998 za działalność naukową;
- Podziękowanie Kolegium Rektorów Miast Polskich za zaangażowanie i czynne uczestnictwo w X i XII edycjach Poznańskiego Festiwalu Nauki i Sztuki;

Referaty na międzynarodowych i krajowych konferencjach tematycznych

1. G. Musiał, G. Kamieniarz, R. Dekeyser, L. Dębski, M. Bieliński, *Extended effective-field methods for lattice-spin systems*, International Seminar on Phase Transitions and Critical Phenomena, Poznań, 12.4-6, 1997
2. L. Dębski, *Diagram fazowy modelu Ashkina-Tellera*, V Minisymposium Fizyki Statystycznej, Poznań - Wrocław, 2000r.
3. L. Dębski, *Symulacje wybranych magnetyków o spinie 1/2*, Instytut Fizyki Molekularnej PAN w Poznaniu, 2000r.
4. G. Musiał, L. Dębski, G. Kamieniarz, *Application of computer simulations to phase transitions in the Ashkin-Teller model*, SGI Users' Conference, Kraków, 10.11-14, 2000
5. G. Musiał, L. Dębski, *Monte Carlo Method with Parallel Computation of Phase Transitions in the Three-Dimensional Ashkin-Teller Model*, Fourth International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics, Nałęczów, 09.9-12, 2001
6. G. Musiał, L. Dębski, G. Kamieniarz, *Monte Carlo simulations of the three-dimensional Ashkin-Teller model: continuous phase transitions lines*, The European Conference on Physics of Magnetism'02, Poznań, 07.1-5, 2002
7. G. Musiał, L. Dębski, *Parallelization of simulations of the Monte Carlo type: 3D Ashkin-Teller Model*, International Conference on Distributed computing and Grid technologies in science and education GRID'2006, Dubna (Russia), 06.26-30, 2006
8. G. Musiał, L. Dębski, D. Jeziorek-Knioła, K. Gołąb, *A self-scheduling scheme for parallel processing in heterogeneous environment: simulations of the Monte Carlo type*, Seventh International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics, Gdańsk, 09.9-12, 2007
9. G. Musiał, L. Dębski, *Jak zmusić wiele procesorów do wykonywania tego samego programu albo superkomputer dla każdego*, X Poznański Festiwal Nauki i Sztuki, Wydział Fizyki UAM, 10.10.2007
10. G. Musiał, L. Dębski, *Równoległy superkomputer z pecetów osiągalny dla każdego*, VII edycja Wykładów Otwartych, Wydział Fizyki UAM, 09.01.2008 (wykład na zaproszenie)
11. L. Dębski, *2D Falicov-Kimball model in the perturbative regime at finite-temperatures*, The European Conference PHYSICS OF MAGNETISM 2008 Poznań, 06.24-27, 2008, Poznań

Dębski

12. G. Musiał, L. Dębski, M. Antkowiak, *Komputery równoległe i gridy obliczeniowe*, XII Poznański Festiwal Nauki i Sztuki, Wydział Fizyki UAM, 2009, wykład popularno-naukowy
13. L. Dębski, Report on Workshop Models and Theory for Molecular Magnetism, CECAM-Lyon, 2006 06.18-21
14. L. Dębski, G. Musiał, J. Rogiers, *Monte Carlo simulations of a spin-lattice model with a multicomponent order parameter: the 3D Ashkin-Teller model*, Oddział Fizyki i Astronomii Wydziału Nauk Przyrodniczych Katolickiego Uniwersytetu w Leuven, 08.2010, Belgia
15. D. Jeziorek-Knioła, G. Musiał, L. Dębski, J. Rogiers, S. Dylak, *On non-Ising phase transitions in the 3D standard Ashkin-Teller model*, The European Conference Physics of Magnetism 2011 (PM'11), Poznań, 27.06 - 1.07, 2011
16. XVIII Minisymposium Fizyki Statystycznej, 1.07.2013r., Wydział Inżynierii Mechanicznej i Informatyki, Politechnika Częstochowska, *Diagram fazowy modelu Falicova-Kimballa z połowicznym wypełnieniem*

L. Dębski

Aktywny udział w międzynarodowych i krajowych konferencjach naukowych

1. G. Kamieniarz, G. Musiał, L. Dębski, M. Bieliński, R. Dekeyser, *Quantum effects and critical behaviour in low-dimensional spin-1/2 systems*, The Euroconference "Physics of Magnetism'96", Poznań, 06.24-28, 1996
2. G. Kamieniarz, G. Musiał, L. Dębski, M. Bieliński, R. Dekeyser, *Simulations of the low-dimensional Ising and Heisenberg models*, The 8th Joint EPS-APS International Conference on Physics Computing'96 Kraków, 09.17-21, 1996
3. G. Kamieniarz, R. Dekeyser, G. Musiał, L. Dębski, M. Bieliński, *Modified effective-field approach to low-dimensional spin-1/2 systems*, International MECO Conference, Szklarska Poręba, 10.3-5, 1997
4. G. Kamieniarz, G. Musiał, P. Kozłowski, L. Dębski, R. Dekeyser, *Symulacje klasycznych modeli spinowych*, Konferencja Fizyki Komputerowej, Kraków, 11.24-26, 1997
5. G. Kamieniarz, G. Musiał, L. Dębski, M. Bieliński, R. Dekeyser, *Effective-field ideas and simulations of phase transitions in lattice-spin systems*, 11th International Seminar on Phase Transitions and Critical Phenomena, Wrocław, Polanica Zdrój, 05.4-7, 1998
6. G. Kamieniarz, G. Musiał, L. Dębski, J. Rogiers, *Simulations of the Ashkin-Teller model: phase diagram in 2 and 3 dimensions*, 20th IUPAP International Conference on Statistical Physics, Paris, 07.20-24, 1998
7. G. Musiał, G. Kamieniarz, R. Dekeyser, L. Dębski, M. Bieliński, *Effective-field ideas and simulations of phase transitions in lattice-spin systems*, 20th IUPAP International Conference on Statistical Physics, Paris, 07.20-24, 1998
8. G. Musiał, L. Dębski, G. Kamieniarz, *Monte Carlo simulations of phase transitions in the three-dimensional Ashkin-Teller model*, XII School of Modern Physics: Phase Transitions and Critical Phenomena, Łądek Zdrój, 06.21-24, 2001
9. G. Musiał, G. Kamieniarz, L. Dębski, *Monte Carlo simulations of continuous phase transitions in the 3D Ashkin-Teller model*, Conference on Computational Physics 2001, Aachen, Germany, 09.5-8, 2001
10. L. Dębski, G. Musiał, J. Rogiers, *A Monte Carlo study of continuous non-Ising phase transitions in the 3D Ashkin-Teller Model using the OpenMosix cluster of Linux PCs*, Fifth International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics, Częstochowa, 09.7-10, 2003
11. G. Musiał, J. Wojtkiewicz, L. Dębski, *A Monte Carlo study of the Falicov-Kimball model in the perturbative regime: preliminary results*, The European Conference on Physics of Magnetism'05, Poznań, 06.24-27, 2005
12. G. Musiał, L. Dębski, J. Wojtkiewicz, *A Monte Carlo study of the Falicov-Kimball model in the perturbative regime*, International Conference Statistical Physics 2006, Kharkiv (Ukraine), 09.11-15, 2006
13. Lech Dębski, J. Kłos, G. Musiał, K. Sitak and A. Wawrzyniak, *Parallel Programming in openMosix and Java clusters: the Monte Carlo simulations of Falicov-Kimball and Ashkin-Teller models*, Juelich, 01.23-27, 2006

14. L. Dębski, G. Musiał, J. Wojtewicz, *A Monte Carlo study of the spinless Falicov-Kimball model in the perturbative regime*, DPG-Frühjahrstagung - CMD21, 03.27-31, 2006
15. L. Dębski, *Monte Carlo simulations of the Ashkin-Teller model*, The European Conference on Physics of Magnetism'99, Poznań, 07.21 - 25, 1999
16. G. Kamieniarz, L. Dębski, *Phase diagram of the Ashkin-Teller model*, Wrocław, Polanica Zdrój, 11th International Seminar on Phase Transitions and Critical Phenomena, 05.4-7, 1998
17. G. Kamieniarz, L. Dębski, *Monte Carlo analysis of the Ashkin-Teller spin models*, 7th European Magnetic Materials and Applications Conference, Zaragoza, Spain, 09.9-12, 1998
18. L. Dębski, *2D Falicov-Kimball model at finite-temperatures*, The European Conference PHYSICS OF MAGNETISM 2011 Poznań, 06.27-07.01, 2011

L. Dębski

Udział w komitetach organizacyjnych krajowych konferencji naukowych

- Przewodniczący sesji, *Kompetencje kluczowe uczniów gimnazjum*, 25-26.08.2012., Szczecin
- Przewodniczący sesji, Poznański Festiwal Nauki i Sztuki w latach 2015 - 2016r., Wydział Fizyki, Uniwersytet im. A. Mickiewicza w Poznaniu, Poznań

Udział w konsorcjach i sieciach badawczych

- Europejska sieć doskonałości MAGMANet *Molecular Approach to Nanomagnets and Multifunctional Materials*, 01.05.2005 – 30.04.2009, wykonawca

Osiągnięcia dydaktyczne i w zakresie popularyzacji nauki

1. Współorganizator Letniej Szkoły Bioinformatyki 1998
2. Wykłady popularyzujące naukę podczas X i XII edycji Poznańskiego Festiwalu Nauki i Sztuki;
3. Współorganizator: Wielki zderzacz hadronów (LHC);
4. Ukończenie Studium Nowoczesnej Metodyki Kształcenia;
5. Wymiana doświadczeń wdrożenia Europejskich Ram Kwalifikacyjnych na Katolickim Uniwersytecie Leuven (Belgia) - udział w dyskusji, 2010;
6. Opracowanie wykładów w języku angielskim z tematu systemów rozproszonych dla Fundacji Przedsiębiorczości Akademickiej w ramach projektu Wirtualnej Akademii Bioinformatyki na platformę e-learningową, 2010;
7. Prowadzone zajęcia dydaktyczne
 - Wykłady
 - (a) system unix - Wydział Fizyki UAM
 - (b) systemy operacyjne - PWSZ w Kaliszu
 - (c) technologie internetowe - PWSZ w Kaliszu
 - (d) bazy danych - PWSZ w Kaliszu
 - (e) sieci komputerowe - PWSZ w Kaliszu
 - (f) systemy rozproszone - Bioinfobank
 - Ćwiczenia
 - (a) system unix - Wydział Fizyki UAM
 - (b) bazy danych - Wydział Fizyki UAM
 - (c) systemy operacyjne - Wydział Fizyki UAM
 - (d) algorytmy i struktury danych - Wydział Fizyki UAM
 - (e) języki skryptowe - PWSZ w Kaliszu

- (f) technologie informacyjne - PWSZ w Kaliszu
- (g) wstęp do informatyki i elektroniki cyfrowej - Wydział Fizyki UAM
- (h) fizyka dla informatyków - Wydział Matematyki UAM
- (i) MS Windows and UNIX/Linux (AMU-PIE - Programmes for International Exchange) - Wydział Fizyki UAM

Opieka naukowa nad pracami magisterskimi

1. Konrad Pawłowski, *Portal e-commerce jako zastosowanie w e-biznesie*, Wydział Fizyki UAM, 2005-2007, obrona - 31.07.2007;
2. Tomasz Pluciński, *Serwer intranetowy jako rozwiązanie usług informacyjnych w instytucjach pożytku publicznego*, Wydział Fizyki UAM, 2005 -2007, obrona - 10.07.2007;
3. Krzysztof Majewski, *Modyfikacja, wyciszenie, chłodzenie i tuning komputera PC w świetle norm CE*, Wydział Fizyki UAM, 2005 - 2007, obrona - 25.09.2007;
4. Sławomir Jabłoński, *MobiInvest - mobilny system inwestycyjno-finansowy*, Wydział Fizyki UAM, 2006 - 2008, obrona - 04.03.2008;
5. Kamil Sobieraj, *Wizualizacja danych numerycznych w środowisku Webowym*, Wydział Fizyki UAM, 2006 - 2008, obrona - 08.07.2008;
6. Grzegorz Niecka, *Bezpieczeństwo serwerów sieciowych*, Wydział Fizyki UAM, 2004 - 2006, obrona - 25.07.2006;
7. Arkadiusz Wawrzyniak, *Wizualizacja i modelowanie równoległych oraz rozproszonych systemów informatycznych*, Wydział Fizyki UAM, 2004 - 2006, obrona - 29.08.2006;
8. Krzysztof Sitak, *Monitorowanie i zarządzanie klastrami opartymi na systemie Linuks*, Wydział Fizyki UAM, 2004 - 2006, 05.09.2006;
9. Łukasz Wojtysiak, *Bezpieczeństwo usług sieciowych*, Wydział Fizyki UAM, 2007 -2009, obrona - 22.09.2009
10. Marcin Zaleśny, *Zdalna administracja usługami sieciowymi w systemie Linuks*, Wydział Fizyki UAM, 2007 - 2009, obrona - 22.09.2009
11. Marcin Kołodziejczyk, *Prezentacja danych numerycznych w czasie rzeczywistym w formie dynamicznych stron HTML*, Wydział Fizyki UAM, 2007 -2009, obrona - 27.10.2009
12. Arkadiusz Arcimowicz, *Inteligentny budynek - zdalne zarządzanie nieruchomością przy użyciu linii telefonicznej*, Wydział Fizyki UAM, 2007 - 2009, obrona - 24.11.2009

UWAGA: W dorobku moim mam tylko opiekę naukową nad studentami, gdyż pracami magisterskimi (co do zasady) kierują osoby ze stopniem doktora habilitowanego.

Stáže w zagranicznych i krajowych ośrodkach naukowych

- Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Dresden, Drezno, Niemcy styczeń 2006, stypendium naukowe;
- John von Neumann Institute for Computing (NIC), Forschungszentrum Jülich, Niemcy, marzec 2007, stypendium naukowe;
- Instytut Fizyki Teoretycznej, Katolicki Uniwersytet Leuven, Belgia, wrzesień 1998, sierpień 2010, stypendium naukowe;

Podnoszenie kwalifikacji zawodowych

1. Ukończenie Studium Nowoczesnej Metodyki Kształcenia;
2. Ukończenie kursu języka niemieckiego w Szkole Językowej UAM – poziom B2 i C1, 2011 - 2013;
3. Ukończenie kursu Programowania High Performance Fortran w PCSS, 1999;
4. Ukończenie kursu Programowania wizualnego na Politechnice Poznańskiej, 1998;
5. Ukończenie kursu programowania równoległego w Forschungszentrum Jülich, 2006;
6. Ukończenie szkolenia *Inicjatywa technologiczna II – jak skutecznie aplikować o środki na badania*, 2007;
7. Ukończenie szkolenia *Foresight – narzędzie wspierające transfer wiedzy między nauką i przedsiębiorstwami*, 2012;
8. Ukończenie szkolenia *Naukowiec negocjatorem – partnerem – przedsiębiorcą*, 2012;

Współpraca

- prof. dr hab. Grzegorz Musiał – Wydział Fizyki, UAM,
- prof. dr hab. Grzegorz Kamieniarz – Wydział Fizyki, UAM,
- prof. Jos Rogiers – Instytut Fizyki Teoretycznej, Katolicki Uniwersytet Leuven, Belgia,
- prof. dr hab. Wojtkiewicz – Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski,
- prof. dr hab. Jarosław Kłos - Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Dresden; Wydział Fizyki, UAM,
- prof. R.Dekeyser - Instytut Fizyki Teoretycznej, Katolicki Uniwersytet Leuven, Belgia,
- prof. H.W.J. Blöte - Lorentz Institute, Leiden University, Holandia,

Dobry

Recenzje publikacji w czasopismach międzynarodowych i krajowych

- Piotr Kolanek, *Podstawy Informatyki - teoria, zastosowania praktyczne, przykłady zaawansowane*, PWSZ, Kalisz 2003r.
- Andrzej Syguła, *Technologie internetowe w nauczaniu*, UAM, Poznań 2005r.
- Phase Transitions - 1

Inne osiągnięcia

- Zbudowanie i administrowanie klasterem openMosix, na którym m. in. przeprowadzono obliczenia i uzyskano wyniki do publikacji naukowej *Synchronization and partial synchronization of linear maps*, A. Lipowski, M. Droz, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Volume 347, 1 March 2005, Pages 38-50
- Współautor urządzenia do zdalnego zarządzania nieruchomością przy użyciu linii telefonicznej, 2008
- Inicjator przetwarzania równoległego w środowisku rozproszonym na Wydziale Fizyki UAM i moim Zakładzie Fizyki Komputerowej. Jego zastosowanie w eksperymentach komputerowych typu Monte Carlo dużej skali.

Łecki Jędrzej