

11/04/2023, Warszawa

Prof. dr hab. Krzysztof Byczuk

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wydział Fizyki

Uniwersytet Warszawski

Pasteura 5

02-093 Warszawa

Recenzja rozprawy doktorskiej pani mgr Anny Piekarskiej

Rozprawa doktorska pani mgr Anny Piekarskiej pod tytułem „Fazy szkliste w układach oddziałujących bozonów z nieporządkiem” powstała w Instytucie Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych Polskiej Akademii Nauk we Wrocławiu. Promotorem pracy jest prof. dr hab. Tadeusz Kopeć. Rozprawa napisana jest w języku polskim, zawiera 122 strony podzielonych na siedem rozdziałów, bibliografię, spis symboli, słownik, spis rysunków, spis tabel, listę publikacji autorki, listę wystąpień konferencyjnych autorki. Tekst rozprawy opiera się na sześciu opublikowanych pracach naukowych, w których pani mgr Piekarska jest współautorką i jednocześnie pierwszym autorem. Pani Piekarska ma też spory dorobek dodatkowy i udział w wielu międzynarodowych i krajowych konferencjach naukowych, co warto jest odnotowania.

We Wstępie autorka przedstawia w sposób ogólny zagadnienia i motywacje stanowiące temat jej rozprawy doktorskiej. Przedstawia szczegółowe cele pracy. Opisuje też strukturę swojej dysertacji.

W rozdziale pierwszym, zatytułowanym „Układy z oddziaływaniem i nieporządkiem” pani Piekarska opisuje układy fizyczne będące w temacie jej pracy doktorskiej. Są to szkła spinowe, silnie oddziałujące bozony na sieci, oraz kwantowe fazy szkliste w układach bozonowych z oddziaływaniem i nieporządkiem. Rozdział ten stanowi elementarne wprowadzenie do dyskutowanych dalej zagadnień i jest bardzo dobrze odbierany przez czytającego. Jedynie zwróciłbym uwagę na nieścisłość na stronie 10: ‘-potencjał chemiczny, który pochodzi od jednocząstkowej energii potencjalnej’. Potencjał chemiczny jest niezależną zmienną termodynamiczną w wielkim zespole kanonicznym, niezależny od zewnętrznego potencjału. Nie należy go mylić z tzw. potencjałem elektrochemicznym. Dla wygody potencjał chemiczny dopisujemy do Hamiltonianu układu, zamiast jako dodatkowy wyraz w sumie statystycznej. Nie zmienia to jednak jego definicji. Dalej na str. 14 pojawia się wręcz wartość potencjału chemicznego jako średnia z potencjału pułapki magneto-optycznej. Czyli potencjał chemiczny nie jest niezależną zmienną termodynamiczną?

Rozdział drugi zatytułowany jest „Wstęp teoretyczny”. Zawiera on niezbędne koncepcje teoretyczne i matematyczne, użyte w dalszej części rozprawy. Są to elementy teorii Landaua przejść fazowych, wprowadzenie metody replik, oraz wprowadzenie do metody Trottera. Są też zdefiniowane parametry porządku dla różnych faz, badanych w dalszej części rozprawy. Rozdział ma charakter

pedagogiczny i jest bardzo pomocny w dalszym zrozumieniu pracy. Z kilku uwag jakie mam jest pytanie o komentarz dlaczego nie ma wyrazu rzędu czwartego w q , w rozwinięciu (2.10) na stronie 19, skoro rozwinięcie w Δ jest właśnie w czwartym rzędzie. Dalej, dowód wzoru (2.21) na str. 22 jest bardziej złożony niż przedstawiona sekwencja równań (2.22). Powołanie się na tzw. regułę de l'Hospitala nie pomaga. We wzorach (2.44) czy (2.45) na formułę Trottera brakuje M w mianownikach argumentów funkcji wykładniczych. W ciekawej dyskusji nad problemem uśredniania w układach nieergodycznych na str. 27-28 przydałoby się nawiązanie do termodynamiki Hilla, gdzie wydaje mi się, że dość podobne koncepty zostały użyte jeszcze w latach 60'tych zeszłego wieku.

Rozdział trzeci, pt. „Wyprowadzenia analityczne” przedstawia oryginalne osiągnięcia autorki związane z analitycznymi obliczeniami i przybliżeniami zastosowanymi do bozonowego modelu Hubbarda z przypadkowymi amplitudami przeskoku z rozkładem Gaussowskim. Jest to podstawowy model opisujący cząstki kwantowe na sieci, w tym przypadku bozony. Ze względu na całki przeskoku, będące zmiennymi losowymi zadanymi ciągłym rozkładem Gaussa, otrzymujemy model z nieskończeniem długo-zasięgowym hoppingiem. Jak rozumiem, z tego powodu rozpatrywany rodzaj sieci przestaje odgrywać istotną rolę. Ale jednak dla jasności przydałaby się informacja na temat rodzaju rozpatrywanej sieci, jej wymiarowości i z jakiego zbioru czerpane są wartości indeksów numerujących węzły sieci. Obliczenia analityczne opierają się na trzech elementach. Pierwszym jest zastosowanie metody replik, co upraszcza znajdowanie średnich po nieporządku dla energii swobodnej i funkcji korelacji. Procedura wymaga wykonania przedłużenia analitycznego liczby replik, z liczb naturalnych do zespolonych i wzięciu granicy dążącej do zera. Nie jest to procedura jednoznaczna i zbyt dobrze kontrolowana. Przydała by się głębsza analiza i dyskusja tego zagadnienia w tym konkretnym przypadku. Kolejnym krokiem było wykorzystanie metody Trottera i rozbiciu funkcji wykładniczej sumy operatorów hamiltonianu na iloczyn poszczególnych wyrażeń. W tym celu sam hamiltonian został zapisany przez operatory „położenia” i „pędu”, będące kombinacją liniową operatorów kreacji i anihilacji z wielocząstkowej przestrzeni Focka. Zabieg ten dotyczył jedynie części kinetycznej. Oddziaływanie w hamiltonianie Hubbarda nadal zapisane jest za pomocą operatorów liczb cząstek z drugiej kwantyzacji. W dalszych obliczeniach potrzebne elementy macierzowe są wyznaczane jednak w bazie/reprezentacji liczb obsadzeni. Pozostaje więc pytanie jaki jest cel i zamiysł dokonania tej transformacji. Czy rozbicia Trottera nie można przeprowadzić było w oryginalnej reprezentacji z operatorami kreacji i anihilacji? I dlaczego? Po rozbiciu Trottera i wykonaniu uśredniania po nieporządku różne repliki, z różnymi indeksami są ze sobą sprzężone, dlatego kolejny etap zawiera transformację Hubbarda-Stratonovicha, sprowadzająca problem do całek Gaussowskich. Szczegółowe wyprowadzenie i jego dyskusja została podzielona na dwa przypadki. Pierwszy gdy średnia z całki przeskoku jest zero. I drugi w ogólnej sytuacji. Oczywiście przypadek pierwszy zawiera się drugim, ale ze względów historycznych oraz jasności wyводу przedstawiono je osobno. To był bardzo dobry pomysł, uwzględniając złożoność obliczeń. Ostatnim elementem wyprowadzenia pozostaje przybliżenie punktu siedłowego dla wielowymiarowych całek. Nie jest to jawnie powiedziane, czy w granicy termodynamicznej wyprowadzenie przedstawione w pracy doktorskiej jest ścisłe? Czy ma charakter przybliżenia średniego pola? Mam oczywiście też na myśli granicę nieskończonych przedziałów Trottera i ścisłego przedłużenia analitycznego i granicy w metodzie repliki. Przydałaby się dyskusja w tym względzie. W rozdziale tym omówiono szczegółowo wielkości wyznaczane w sposób samo-zgodny i sposoby wyznaczania linii na odpowiednich diagramach fazowych. Czy w równaniu (3.99) powinien być wyraz logarytm M , dający zależność od U .

Kolejny, czwarty rozdział zatytułowany „Obliczenia numeryczne” poświęcony jest omówieniu praktycznych zagadnień potrzebnych do numerycznego rozwiązania problemu samo-zgodnego oraz wyznaczeniu potrzebnych sum i całek. Wprowadzono też układ jednostek, w którym przyjęto za punkt odniesienia $U=1$. Wydaje się to trochę niefortunne, gdyż granica układu nieoddziałującego na ogół jest dobrze znana, a przy takim wyborze jednostek dość trudna do znalezienia. Z powodu ograniczonej pamięci w komputerze konieczne było też wprowadzenie odcięcia na maksymalne obsadzeni jednocząstkowego stanu w bozonowej przestrzeni Focka. O ile rozumiem tą konieczność to ciekawe jest zastanowienie się nad problemem istnienia kondensacji Bosego-Einsteina w tej sytuacji. Dla układu bez oddziaływania, gdzie obsadzenie jednocząstkowego stanu jest skończone, szereg na sumę statystyczną jest zbieżny dla wszystkich potencjałów chemicznych. Wydaje się, że nie ma wtedy miejsca na kondensację BEC. Czy więc obcięcie przestrzeni stanów dla bozonów wpływa istotnie na istnienie fazy nadpłynnej w modelu Hubbarda? W dalszej części tego rozdziału autorka omawia sposoby generowania zestawów zmiennych posługując się różnymi metodami algorytmicznymi, aby ograniczyć czas egzekucji programu numerycznego. Omówiono też przeszkody stojące na zastosowaniu metody Monte-Carlo do obliczeń wielokrotnych sum i całek. Ponieważ układ ma wbudowany nieporządek, pomimo bozonowej natury jest podatny na problem znaku. Pozostało więc wyznaczanie całek bezpośrednio metodą kwadratur gaussowskich. Brakuje mi szczegółów jak są w praktyce wyznaczane elementy macierzowe typu (4.20) i przechodzenie od jednej reprezentacji do drugiej. Niepokoi mnie stwierdzenie w publikacjach autorki, że jest to ad-hoc funkcja p i q . Co to znaczy ad-hoc?

Kolejny rozdział „Stabilność rozwiązania symetrycznego” podaje szczegółowe kryteria istnienia rozwiązań charakterystycznych dla danej fazy. Analiza istnienia minimum energii swobodnej, równoważne do badania dodatnio-określoności odpowiedniej macierzy Hessego, prowadzi do konkluzji, że faza nieuporządkowana jest stabilna, faza szklista jest niestabilna, a faza nadpłynna ma zarówno stabilną jak i niestabilną część. Jest to bardzo rzeczowa i interesująca analiza w zastosowaniu do modelu Hubbarda z nieporządkiem dla bozonów.

Esencję pracy stanowią rozdziały szósty i siódmy, gdzie przedstawiono wyniki fizyczne dla omawianego modelu. W rozdziale szóstym, pt. „Diagramy fazowe” autorka omawia otrzymane diagramy fazowe osobno dla dwóch przypadków $J_0=0$ i J_0 niezerowe. Dla łatwiejszego przypadku z $J_0=0$ jest przedstawiona analiza wyników w zależności od ilości cięć Trottera i ich ekstrapolacja do granicy nieskończoności. Trójwymiarowy diagram fazowy dla ustalonej temperatury przedstawia rys. 6.3. Zidentyfikowano fazę nieuporządkowaną, szklistą, szklisto-nadpłynną i nadpłynną. Dalej przedstawiono ciecia diagramu w funkcji potencjału chemicznego i dyspersji całki przeskoku. W dalszej części odpowiednie diagramy dla oddziałujących bozonów przedstawiono w funkcji temperatury i odpowiednio pozostałych parametrów.

Ostatni rozdział, siódmy, pt. „Własności dynamiczne i termodynamiczne układu” przedstawia wykresy dla parametrów porządku, funkcji korelacji oraz ściśliwości i odpowiedniej podatności dla parametru porządku fazy szklistej. Okazuje się, że odpowiednikiem fazy Motta jest tutaj faza nieuporządkowana, własności której są częściowo zmodyfikowane skończoną temperaturą. Koncepcja izolatora i przewodnika ma ścisłą definicję jedynie z zerowej temperaturze. Podatność dla fazy szklistej spełnia prawo Curie z potęgą jeden.

Rozprawę zamyka podsumowanie będące streszczeniem otrzymanych wyników zarówno analitycznych jak i numerycznych.

Praca doktorska pani mgr Anny Piekarskiej jest bardzo ciekawa i zawiera wiele nowych i ważnych wyników fizycznych. Przedstawia ona szczegółową analizę modelu Hubbarda z nieporządkiem w całkach przeskoku (poza-diagonalnym) dla bozonów. Przedstawia diagramy fazowe dla tego modelu, omawia jego najważniejsze własności fizyczne oraz przedstawia schemat możliwej realizacji eksperymentalnej. Na uwagę zasługuje nowe przewidywanie istnienia fazy nadpłynno-szklistej, co stanowi ciekawe odkrycie naukowe. Silną stroną rozprawy jest też nowatorska i unikatowa analiza problemu wykorzystująca techniki replik i Trottera. Przedstawiono w szczególności podejście analityczne oraz aspekty numeryczne, dbając też o pedagogiczne wprowadzenie do tych niezwykle trudnych problemów. Praca jest znakomicie napisana oraz zredagowana i złożona w postaci książkowej. Może stanowić znakomitą pomoc dydaktyczną dla kolejnych doktorantek i doktorantów. Mojej wysokiej oceny pracy nie zmieniają poruszone w recenzji kwestie i pytania. Stanowią one element dyskusji i ciekawości naukowej, a nie krytyki.

Podsumowując, uważam, że rozprawa doktorska pani mgr Anny Piekarskiej spełnia wszystkie zwyczajowe i formalne kryteria i wnioskuje o dopuszczenie doktorantki do publicznej obrony i nadaniu jej stopnia doktora nauk ścisłych w dyscyplinie nauki fizyczne.

Ponadto wnoszę o wyróżnienie pracy doktorskiej pani mgr Anny Piekarskiej za opracowanie analitycznych i numerycznych metod analizy modelu oddziałujących bozonów na sieci z nieporządkiem i znalezieniu nowych diagramów fazowych, nowych faz, i zbadaniu ich własności, co jest udokumentowane w 6 publikacjach w tym jednej w Physical Review Letters.

Krzysztof Byczuk

