

Prof. dr hab. Marcin Mierzejewski
Instytut Fizyki Teoretycznej
Wydział Podstawowych Problemów Techniki
Politechnika Wrocławska
Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

Recenzja rozprawy doktorskiej Pani mgr Anny Piekarskiej pt.
"Fazy szkliste w układach oddziałujących bozonów z nieporządkiem"

Rozprawa doktorska Pani mgr Anny Piekarskiej stanowi odrębną publikację wydaną przez Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych. Zostały w niej omówione wyniki sześciu innych prac naukowych, które doktorantka opublikowała wspólnie ze swoim promotorem, prof. dr. hab. Tadeuszem Kopciem. Najważniejsza i chronologicznie pierwsza z tych prac ukazała się w *Phys. Rev. Lett.* w 2018 r. Pozostałe prace zostały opublikowane w bardzo dobrych i dobrych czasopismach, takich jak *Phys. Rev. B*, *J. Stat. Mech.*, *Phys. A*. Jedna praca ukazała się w *Acta Phys. Pol. A*.

Rozprawa doktorska zawiera teoretyczną analizę układu nieuporządkowanych, silnie oddziałujących bozonów w reżimie niskich temperatur. Własności układów kwantowych z oddziaływaniami i nieporządkiem były w ciągu ostatniej dekady przedmiotem intensywnych badań teoretycznych. W tym kontekście badane były przede wszystkim zagadnienia związane z ergodycznością układów oddziałujących fermionów lub spinów w reżimie wysokich energii (tj. wysokich temperatur w przypadku układów ergodycznych). Głównym celem badań Pani mgr Anny Piekarskiej było wyznaczenie diagramu fazowego oddziałujących bozonów w reżimie niskich temperatur oraz scharakteryzowanie występujących tam faz, głównie fazy szklistej oraz nadciekłej. W analizowanym modelu bozony oddziałują ze sobą lokalnie, w sposób typowy dla modeli typu Hubbarda, natomiast energia kinetyczna obejmuje przeskoki pomiędzy dowolnymi węzłami sieci, a odpowiadające im całki przeskoku traktowane są jako niezależne zmienne losowe zadane przez rozkład Gaussa. Dopuszczenie przeskoków pomiędzy dowolną parą węzłów sieci jest stosunkowo silnym przybliżeniem, które jednak trudno jest krytykować, ze względu na bardzo dużą złożoność analizowanego problemu. Złożoność ta wynika z konieczności jednoczesnego uwzględnienia nieporządku oraz oddziaływań wielociałowych w reżimie niskich lecz niezerowych temperatur, gdzie standardowe metody numeryczne obarczone są dużymi błędami.

Analiza problemu badanego w rozprawie wymagała od Autorki przeprowadzenia złożonych obliczeń analitycznych i numerycznych. Przedstawienie tego typu badań w sposób precyzyjny a jednocześnie przystępny stanowi zawsze ogromne wyzwanie. Autorka rozprawy doskonale poradziła sobie z tym problemem dobierając odpowiednią strukturę rozprawy doktorskiej. Pierwsze dwa rozdziały zawierają ogólny wstęp uwzględniający przegląd literatury oraz bardzo przystępne i intuicyjne omówienie zagadnień analizowanych w rozprawie. Złożone obliczenia analityczne zostały zaprezentowane w rozdziałach trzecim oraz piątym. Rozdział czwarty omawia szczegóły obliczeń numerycznych. Rozdziały szósty i siódmy zawierają omówienie uzyskanych wyników, które w większości można zrozumieć bez wgłębiania się w szczegóły techniczne związane z prowadzonymi obliczeniami. Rozprawę kończy precyzyjne podsumowanie najważniejszych

wyników oraz bardzo trafne omówienie perspektywy dalszych badań. Należy podkreślić, że Autorka rozprawy w precyzyjny sposób wyodrębniła swoje wyniki naukowe oraz własny wkład w badania naukowe prowadzone wspólnie z prof. Tadeuszem Kopciem. Poniżej omówię bardziej szczegółowo zagadnienia omawiane w poszczególnych rozdziałach rozprawy.

W pierwszym rozdziale rozprawy omówione zostały podstawowe zagadnienia dotyczące fazy szklistej, sieci optycznych oraz oddziałujących bozonów opisywanych modelem Bosego-Hubbarda. Rozdział ten napisany jest w sposób przejrzysty, jednak występuje w nim kilka problemów technicznych, które zwracają uwagę czytelnika. W szczególności pierwszy rysunek zaprezentowany w rozprawie (Rys. 1.1) zawiera oznaczenia, które nie zostały wyjaśnione: J oraz J_0 . W podrozdziale zatytułowanym "Realizacja rozważanego układu w sieci optycznej" wprowadzony jest indeks α , który nie został odpowiednio wytłumaczony, a jego znaczenie można jedynie odgadnąć na podstawie rysunku 1.4. W rozdziale drugim przedstawiony został ogólny zarys teorii Landaua przejść fazowych, omówiona została metoda replik, wzór Trottera-Suzuki, zagadnienia związane z ergodycznością. Zdefiniowano też parametr porządku Edwardsa-Andersona dla szkieł spinowych oraz parametr porządku nadciekłości. Podoba mi się opis metody replik oraz sposób wprowadzenia parametrów porządków. Istotnym problemem jest jednak błąd we wzorze Suzuki-Trottera (równania 2.37 i 2.40 łącznie nie są prawdziwe chyba, że nie rozumiem występujących tam oznaczeń), który to wzór jest wykorzystywany w dalszych obliczeniach analitycznych. Błąd ten jest poprawiony w rozdziale trzecim w równaniu 3.13, więc nie wpływa na oryginalne wyniki prezentowane w rozprawie. Dwa inne podrozdziały zostały opisane zbyt pobieżnie. W szczególności opis w podrozdziale 2.3.1 mógłby sugerować, że wszystkie obserwowalne podlegają samouśrednianiu, co nie jest prawdą. W podrozdziale 2.3.2 poświęconym ergodyczności czytamy, że "układ nieergodyczny składa się z pewnej liczby składowych ergodycznych". Zbyt krótki opis nie pozwala czytelnikowi zrozumieć czym są składowe ergodyczne lub do jakich układów takie stwierdzenie się odnosi. Jeden z ostatnich wzorów w tym rozdziale opisuje ewolucję stanów koherentnych, jednak nie wiadomo jaki hamiltonian jest rozpatrywany. We wstępnej części rozprawy brakuje też choćby krótkiej wzmianki o badaniach dotyczących ergodyczności nieuporządkowanych układów oddziałujących fermionów, które w ostatniej dekadzie były przedmiotem kilkuset prac naukowych. Zakładam, że wymienione wyżej problemy z pierwszych dwóch rozdziałów rozprawy wynikają, przynajmniej częściowo, z dążenia do jak najbardziej przystępnej prezentacji. Intuicyjny sposób prezentacji tej części rozprawy ułatwia zrozumienie obliczeń prowadzonych w dalszej części rozprawy.

Trzeci rozdział prezentuje szczegóły obliczeń analitycznych. Biorąc pod uwagę złożoność tych obliczeń uważam, że omówione zostały one w sposób wyjątkowo spójny i przejrzysty. W początkowej części rozdziału Autorka wprowadza analizowany model i definiuje gęstość prawdopodobieństwa dla losowych całek przeskoku, która odpowiada rozkładowi Gaussa o średniej J_0/N oraz odchyleniu standardowym $J/\sqrt{N}$, gdzie N jest liczbą węzłów sieci. Głównym celem prowadzonych obliczeń jest wyprowadzenie równań pozwalających wyznaczyć linie krytyczne oddzielające fazy występujące w badanym układzie. Uśrednianie po nieporządku wykonano wprowadzając repliki układu. Wyliczając sumę statystyczną nieprzemienne części hamiltonianu rozseparowano stosując metodę Suzuki-Trottera, natomiast sprzężenia pomiędzy różnymi węzłami sieci usunięto przy pomocy transformacji Hubbarda-Stratonovicha. W pierwszej części rozdziału trzeciego omówione zostało wyprowadzenie równań na linię krytyczną dla przypadku, gdy średnia całka przeskoku wynosi zero, i w układzie może występować jedynie faza szklista oraz faza nieuporządkowana. Druga część poświęcona jest bardziej ogólnemu przypadkowi, gdy średnia całka przeskoku jest niezerowa, i w badanym układzie może pojawić się także faza nadciekła.

Istotnym wyzwaniem okazała wówczas się analiza przejścia pomiędzy fazą szklaną a fazą nadciekłą.

Czwarty rozdział rozprawy omawia zagadnienia związane z obliczeniami numerycznymi, które zostały wykonane przez Autorkę w celu wyznaczenia diagramów fazowych badanego modelu. W szczególności omówiona została nieudana próba zastosowania metody Monte Carlo oraz wytłumaczono powody, dla których metoda ta nie prowadzi do zadowalających wyników. Przedyskutowano sposób ograniczenia wektorów bazowych przestrzeni Hilberta, co jest konieczne w przypadku większości obliczeń numerycznych prowadzonych dla układów bozonów. Omówiono także metodę wyliczania całek gaussowskich, w której wykorzystano rozwinięcie całkowanych funkcji w bazie wielomianów Hermite'a.

Rozdział piąty zawiera bardzo ciekawą analizę stabilności rozwiązań, które zostały wyprowadzone w rozdziale trzecim gdzie przyjęto założenie, że analizowane rozwiązania są symetryczne w przestrzeni replik (równanie 5.4). Przeprowadzenie obliczeń wykraczających poza to przybliżenie byłoby bardzo trudne dla modelu analizowanego w rozprawie. Pomimo tej trudności, Autorka przeprowadziła analizę stabilności rozwiązań symetrycznych, co pozwoliło odróżnić fazę nadciekłą od fazy szklisto-nadciekłej, dla której rozwiązanie symetryczne jest niestabilne.

Szósty rozdział rozprawy omawia diagramy fazowe otrzymane dla badanego modelu na drodze obliczeń numerycznych. Pomimo wprowadzonych przybliżeń, obliczenia te wciąż są sporym wyzwaniem, gdyż należy oszacować błędy wynikające ze ograniczenia liczby stanów bazowych przestrzeni Hilberta (przybliżenie to powinno być najlepsze w reżimie niskich temperatur) oraz błędy, które wynikają z wykonania niewielkiej liczby kroków w metodzie Suzuki-Trottera (M), co jest uzasadnione w reżimie wysokich temperatur. Jak można było oczekiwać, największym wyzwaniem pozostaje reżim niskich temperatur, gdzie wyniki uzyskane dla skończonego M muszą być ekstrapolowane do granicy $M \rightarrow \infty$. Sposób ekstrapolacji został przedstawiony na wewnętrznym panelu na rysunku 6.2, jednak nie do końca rozumiem jaki obszar diagramu fazowego jest tam prezentowany. Ważnym rezultatem rozprawy jest porównanie wyników uzyskanych w ramach formalizmu rozwijanego w rozprawie z wynikami otrzymanymi w przybliżeniu losowej fazy (*random phase approximation, RPA*) dla znacznie prostszego układu, w którym nie występuje nieporządek. Porównanie to zostało przedstawione na rysunku 6.5. Doskonała zgodność prezentowanych wyników pokazuje, że przybliżenia wprowadzone w rozprawie uwzględniają korelacje wielociałowe na poziomie przybliżenia *RPA* a jednocześnie pozwalają badać układy z nieporządkiem. W mojej ocenie jest to jeden z najciekawszych wyników recenzowanej rozprawy doktorskiej. Diagramy fazowe obejmujące fazę nieuporządkowaną, szklaną, nadciekłą oraz szklisto-nadciekłą zostały zaprezentowane na rysunku 6.3 oraz kilku kolejnych rysunkach w rozdziale trzecim. Jeden z ciekawszych wyników został przedstawiony na ostatnim panelu rysunku 6.4. Pokazuje on, że dla dostatecznie dużej wartości średniej całki przeskoku faza nadciekła (lub szklisto-nadciekła) oddziela fazę nieuporządkowaną od fazy szklistej.

Ostatni, siódmy rozdział rozprawy omawia szereg wielkości, które pozwalają lepiej zrozumieć własności faz analizowanych w poprzednim rozdziale. W szczególności przedstawiono zależność funkcji autokorelacji od różnicy indeksów numerujących kolejne kroki w metodzie Suzuki-Trottera. Pokazano, że w przypadku fazy szklistej wielkość ta zanika znacznie wolniej niż ma to miejsce w przypadku fazy nieuporządkowanej. Wykazano także, że cechą charakterystyczną fazy nieuporządkowanej jest niewielka ściślność. Dzięki temu fazę nieuporządkowaną można

powiązać z fazą izolatora Motta w układach bez nieporządku. Rozprawę doktorską kończy krótkie podsumowanie najważniejszych wyników. Autorka wskazuje także dwa istotne problemy, które będą przedmiotem jej dalszych badań: nieznikanie anomalnej funkcji autokorelacji w fazach bez nadciekłości oraz dokładniejsze zbadanie symetrii replik.

Nie mam najmniejszych wątpliwości, że rozprawa doktorska Pani mgr Anny Piekarskiej spełnia wszystkie warunki określone w art 13. ustawy z dnia 14.03.2003 r. o stopniach i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki, a także warunki określone w rozporządzeniu Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 30.01.2018. Z tego powodu wnioskuję o przyjęcie rozprawy Pani mgr Anny Piekarskiej i dopuszczenie jej Autorki do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Wniosek o wyróżnienie rozprawy

Rozprawa Pani mgr Anny Piekarskiej związana jest z bardzo aktualną tematyką badawczą, która dotyczy własności nieuporządkowanych układów kwantowych z oddziaływaniami wielociałowymi. Moim zdaniem, problem analizowany w rozprawie jest wyjątkowo złożony, gdyż dotyczy własności układu bozonowego z dalekozasięgowymi całkami przeskoku w reżimie niskich temperatur. Nie jest mi znana żadna inna metoda (analityczna lub numeryczna), która mogłaby dostarczyć dokładniejszych wyników dotyczących własności badanego układu od tych, które zostały zaprezentowane w rozprawie. Drobne uwagi krytyczne wymienione w recenzji dotyczą jedynie technicznych aspektów prezentacji wstępnej części rozprawy. Rozprawa oparta jest na sześciu dwuatorskich publikacjach, w tym jednej pracy opublikowanej w *Physical Review Letters* i jednej pracy w *Physical Review B*. Niewielka liczba autorów tych publikacji jednoznacznie wskazuje, że Pani mgr Anna Piekarska wniosła bardzo istotny wkład w ich powstanie. Biorąc pod uwagę znaczenie uzyskanych wyników oraz złożoność analizowanego problemu wnoszę o wyróżnienie recenzowanej rozprawy doktorskiej.

*Marcin
Mierzejewski*