

Warszawa, 11 listopad 2019

prof. dr hab. Krzysztof Byczuk
Instytut Fizyki Teoretycznej
Wydział Fizyki
Uniwersytet Warszawski
ul. Pasteura 5
02-093 Warszawa

Rada Naukowa
Instytutu Niskich Temperatur i
Badań Strukturalnych PAN we Wrocławiu
ul. Okólna 2
50-422 Wrocław

Recenzja rozprawy doktorskiej pani mgr Barbary Grygiel

Rozprawa doktorska pani mgr Barbary Grygiel nosi tytuł „Zjawiska transportowe w układach ultrachłodnych bozonów w sieciach optycznych” i została wykonana w Instytucie Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego Polskiej Akademii Nauk we Wrocławiu pod kierunkiem dra hab. Tomasza Zalewskiego. Praca jest napisana w języku polskim, składa się z 118 stron tekstu podzielonego na osiem rozdziałów, trzy dodatki, spis literatury, podziękowania i streszczeń w języku angielskim i polskim.

Pierwszy rozdział „Wstęp” zawiera krótkie historyczne wprowadzenie do badań nad układami zimnych atomów i w tym kontekście autorka przedstawia cele postawione w omawianej rozprawie doktorskiej, tzn. zbadanie własności transportowych silnie oddziałujących bozonów w sieci optycznej opisywanych modelem Bosego-Hubbarda w przybliżeniu rotatorów kwantowych. Następnie pojawia się plan rozprawy oraz lista publikacji autorki. Pani mgr Grygiel jest współautorką siedmiu publikacji naukowych z tego trzy w prestiżowych czasopismach Physical Review. Praca doktorska oparta jest na trzech publikacjach z tej listy.

Rozdział drugi „Kondensacja Bosego-Einsteina” stanowi bardziej szczegółowe wprowadzenie do tematyki zimnych atomów i ich kondensatów. Autorka rozpoczyna od omówienia kwantowych gazów bozonowych, przypomnienia rozkładu statystycznego dla swobodnych bozonów, a następnie dość szczegółowo omawia

zjawisko kondensacji Bosego-Einsteina (BE) w układzie izotropowym i jednorodnym i w układzie z zewnętrznym potencjałem wiążącym. Ze względu na dydaktyczny charakter tego rozdziału warto byłoby wspomnieć o pracach Władysława Natansona, który już w 1911 roku wyprowadził dla cząstek materialnych rozkład Bosego z 1926 roku. W dalszych częściach tego rozdziału autorka omawia problem kondensacji BE w układach oddziałujących bozonów, przywołując koncepcję pozadiagonalnego uporządkowania dalekiego zasięgu (ODLRO) i parametru porządku dla nowej fazy. Ostatnia część poświęcona jest omówieniu doświadczeń z zimnymi atomami: metody chłodzenia i pułapkowania, tworzenie sieci optycznych, idei i eksperymentów z symulatorami kwantowymi, metod pomiaru wielkości fizycznych w tych układach. W szczególności przywołane są doświadczenia nad badaniem transportu fermionowych zimnych atomów w złączach punktowych. Prowadzi to autorkę do rozważań nad wykorzystaniem tych układów do badania konwencjonalnych układów ciała stałego w nowych obszarach parametrów i stałych.

W rozdziale trzecim autorka rozprawy omawia przejście fazowe pomiędzy fazą nadpłynną a fazą izolatora Motta w rzeczywistych eksperymentach z bozonowymi atomami na sieci i w modelu Bosego-Hubbarda (BH). Zostało przywołane rozwiązanie modelu BH w tak zwanym przybliżeniu Gutzwillera, które dla bozonów pozwala jakościowo opisać fazę nieściśliwą izolatora Motta i fazę nadpłynną z nietrywialnym parametrem porządku. Jest to najprostsze, jednowęzłowe przybliżenie opisujące omawiane kwantowe przejście fazowe i stanowi punkt odniesienia dla innych, przybliżonych teorii. Ostatnia część tego rozdziału opisuje historyczny już eksperyment, w którym obserwowano pojawianie się na zmianę w czasie izolatora Motta i cieczy nadpłynnej zbudowanych z atomów rubidu 87.

Rozdział czwarty zawiera explicite wymienione cele pracy: wyznaczenie funkcji korelacyjnej prąd-prąd w modelu BH, systematyczne zbadanie zachowania przewodności w zależności od parametrów modelu BH, wyznaczenie wartości stałej uniwersalnej, zmodyfikowanie przedstawionego formalizmu w celu opisu własności transportowych układów o wielopasmowej strukturze energetycznej, zbadanie modyfikacji zjawisk transportowych w obecności jednorodnego pola magnetycznego. Uważam ten króciutki (dwu stronicowy) rozdział za szczególnie przydatny dla czytelnika, nakierowuje jego uwagę na najważniejsze wyniki pracy.

Rozdział piąty poświęcony jest omówieniu metody kwantowych rotatorów. Po omówieniu powodów, dla których wprowadza się kwantowe rotatory, autorka przedstawia formalizm całek po trajektoriach w reprezentacji stanów koherentnych, konstruuje operator ewolucji kwantowej i ostatecznie wyraża sumę statystyczną w wielkim zespole kanonicznym jako całkę funkcjonalną po zespolonych polach. W drugiej części autorka prezentuje poszczególne kroki i przekształcenia prowadzące do znalezienia przybliżonego rozwiązania modelu BH. Jest to bardzo cenna część tej rozprawy, mogąca służyć pomocą przyszłym badaczom pragnącym stosować to

przybliżenie. Rozumiem, że przybliżenie to było oryginalnie zastosowane do modelu BH przez promotora pracy dra hab. T. Zalewskiego i jego współpracowników. Jednakże przy takim obszernym omówieniu metody warto byłoby podać kilka ogólnych informacji w jaki sposób to przybliżenie wiąże się z innymi analitycznymi technikami stosowanymi do tego modelu. Czy przybliżenie to ma charakter kontrolowalny, w sensie istnienia małego parametru perturbacyjnego? Czy istnieje granica/granice, gdy przybliżenie to daje ściśle rozwiązanie modelu? Czy przybliżenie to należy do klasy przybliżeń zachowawczych w sensie Kadanoffa-Bayma i czy jest termodynamicznie spójne? Inne pytania to czy przybliżenie kwantowych rotatorów zachowuje twierdzenie Hugenholtza-Pinesa i twierdzenie Niepomniaschego w różnej liczbie wymiarów. Ostatnia część tego rozdziału demonstrowa przykłady diagramów fazowych modelu BH w ramach przybliżenia kwantowych rotatorów. Brakuje mi tutaj porównania tych wyników ze znanymi ścisłymi wynikami numerycznymi w metodzie kwantowej Monte Carlo dla sieci $d=2$ i 3 . Można też byłoby zrobić porównanie z innymi metodami przybliżonymi, jak bozonowa teoria dynamicznego pola średniego czy metody opartej na rozwinięciu w granicy silnego sprzężenia. Takie porównania dawałyby ilościowy wgląd w zakres stosowalności przybliżenia kwantowych rotatorów.

Rozdział szósty stanowi zebranie analitycznych i numerycznych wyników będących oryginalnym wkładem pani mgr Barbary Grygiel. Stanowią one zasadnicze wyniki tej rozprawy doktorskiej. Tak jak poprzednio, prezentacja wyników analitycznych cechuje się dużą szczegółowością. Rozdział ten rozpoczyna się od wyprowadzenia ogólnego wyrażenia na przewodność optyczną w ramach teorii liniowej reakcji. Należy podkreślić, że stosowana nomenklatura pochodząca z elektrodynamiki jest w pewnym sensie umowna, gdyż rozważane układy zawierają cząstki neutralne znajdujące się w pewnych zewnętrznych potencjałach mechanicznych (choć kreowanych defacto przez prądy i pola magnetyczne). Do wyznaczenia przewodności optycznej autorka stosuje wzory Kubo z teorii liniowej odpowiedzi. Ponieważ celem rozprawy jest określenie przewodności w układach wielopasmowych, więc w krótkim podrozdziale 6.1.2 został przedyskutowany sposób uogólnienia metody kwantowych rotatorów na sieci z bazą, czyli z wieloma pasmami. Wyprowadzenie ogólnych wzorów na przewodność w przybliżeniu kwantowych rotatorów i ich dyskusja znajdują się w podrozdziale 6.1 oraz w dodatku C. W tym miejscu chciałbym podkreślić, że wykonanie zaprezentowanych obliczeń jest trudne, pracochłonne i wymagało od autorki biegłego opanowania technik kwantowej teorii pola w skończonych temperaturach. W podrozdziale 6.2 przedstawiono zastosowanie wyprowadzonej teorii dla układów jednopasmowych. W pierwszej części omówiono redukcję ogólnych wzorów do tego przypadku oraz sposób wykonywania częstości Matsubarowskich oraz przedłużenia analitycznego. Przewodność zapisana została przy użyciu gęstości stanów i uogólnionej gęstości stanów, których postać przedstawiono na rys. 6.2 dla sieci $d=2$ i 3 wymiarowych. Sama przewodność składa się z części regularnej i osobliwej. Kolejne rysunki

6.3-6.11 przedstawiają wyniki numeryczne dla przewodności w fazie izolator i w fazie nadpłynnej w zależności od parametrów modelu. Rysunki maksimów funkcji spektralnych pozwalają na szczegółowe przedyskutowanie wyników. Przedstawiona jest także wartość przewodności uniwersalnej w $d=2$ będąca w bardzo dobrej zgodności z literaturowymi wynikami symulacji Monte Carlo. Ponieważ przewodność optyczna, jej część rzeczywista urojona mają ściśle określone symetrie, przedstawianie ich dla ujemnych wartości częstości jest raczej zbędne. Wyniki prezentowane w tej części uważam za interesujące, a ich dyskusja fizyczna wyczerpująca. Szkoda jedynie, że nie dokonano jakościowego porównania funkcji przewodności dla bozonów z analogicznymi wynikami przewodności dla fermionów w fazie normalnego metalu, izolatora i nadprzewodnika.

Podrozdział 6.3.1 prezentuje wyniki numeryczne dla sieci z bazą, czyli układów wielopasmowych. Jako model do obliczeń przyjęto sieć kwadratową z potencjałem „pochylonym” (staggered) Delta w kierunku osi x . We wzorze (6.47) przedstawiono analityczną postać relacji dyspersji, a na rysunku 6.12 gęstość stanów. Wyniki prezentowane tutaj są dla małych wartości potencjału Delta, gdzie jedynie wydać pewne struktury na wykresach gęstości stanów oraz przewodności, rys. 6.13. Widać, że wraz ze wzrostem Delta pojawia się coraz większy wkład od przewodności między pasmowej. Przedyskutowano wyniki dla zachowania reguły sum, rys. 6.14. Szkoda, że autorka nie zbadała większych wartości potencjału Delta. Powyżej pewnej wartości chyba powinna pojawić się przerwa energetyczna w gęstości stanów, i dla problemów fermionowych z jedną cząstką na węzeł odpowiadałoby to przejściu metal-izolator. Dla bozonów byłoby inaczej, ale porównanie byłoby interesujące. Zabrakło mi też dyskusji dlaczego widoczne struktury w przewodności, rys. 6.13, wzrastają wraz z Delta, ale ich położenie na osi częstości od Delty nie zależy. Jest też pewna niespójność w wartościach Delta na rys. 6.12b oraz na rys. 6.13. Dla porównań dobrze jest mieć te same wartości parametrów kontrolnych.

W podrozdziałach od 6.3.2 do 6.3.6 autorka przedstawia swoje wyniki dla modelu Harpera-Bose-Hubbarda. Jest to dwu-wymiarowy bozonowy model Hubbarda, w którym dodano jednorodne pole magnetyczne prostopadłe do płaszczyzny sieciowej. Pole magnetyczne wchodzi do Hamiltonianu poprzez podstawienie Peierlsa, jako dodatkowa faza w wyrażeniu hoppingowym. (Przy okazji, na stronie 81 pojawia się parametr alfa równy $1/4$, a zdefiniowany dopiero stroną później. Nie ma też definicji kwantu strumienia pola magnetycznego.) Okazuje się, że jeśli stosunek strumienia do kwantu strumienia jest ułamkiem zwykłym, to w cechowaniu Landaua okresowość układu w jednym z kierunków wzrasta, powodując rozszczepienie pasm energetycznych i otwarcie przerw. W pewnym sensie jest to rodzaj sieci z pochylonymi potencjałami, analizowany wcześniej. W pracy przedstawiono wyniki dla 3 wartości tego stosunku. Na rys. 6.16 i 6.19 przedstawiono odpowiednio gęstości stanów i diagramy fazowe. W dalszej części wyprowadzono wzory na przewodność wewnątrz pasmową i międzypasmową w obecności pola magnetycznego. Następnie

przedstawiono te przewodności w fazach izolatora i w fazach nadpłynnych. Towarzyszy temu szczegółowe omówienie tych wyników, łącznie z analizą wpływu temperatury. Rozdział zamyka analiza przewodności uniwersalnej dla tego modelu. Pracę kończy półtorastronicowe podsumowanie oraz strona z wymienionymi kierunkami do dalszych badań jako kontynuacja tematu transportu oddziałujących bozonów na sieci.

Podsumowując, recenzowana praca doktorska pani mgr Barbary Grygiel robi bardzo dobre wrażenie. Wydaje się, że jest spisana bardzo rzetelnie, zawiera wiele szczegółowych wyprowadzeń, prawie w ogóle nie zauważyłem pomyłek drukarskich, dość częstych w innych pracach. Od strony naukowej, prezentowane wyniki są oryginalne, interesujące i mogą mieć wpływ na dalszy rozwój tematyki związanej z bozonami na sieciach optycznych. Pani Grygiel wykazała się dużym warsztatem pracy, doskonale opanowała metody kwantowej teorii wielu ciał i z ogromnym sukcesem zastosowała te techniki do rozwiązania trudnego problemu naukowego. Moje komentarze, pojawiające się w szczegółowej części recenzji pracy dotyczą raczej możliwych uzupełnień tematu, natomiast nie podważają naukowych osiągnięć pracy.

Na koniec stwierdzam, że recenzowana praca spełnia ustawowe i zwyczajowe wymagania dotyczące prac doktorskich i wnioskuję o dopuszczenie jej do publicznej obrony. Wnoszę też o wyróżnienie tej pracy za opracowanie analityczne i numeryczne teorii transportu w układach oddziałujących bozonów na sieciach optycznych bez lub w obecności pola magnetycznego. Otrzymanie tych wyników wymagało wykonania wielu żmudnych obliczeń w ramach kwantowej teorii pola.



Krzysztof Byczuk