



Dr hab. Tomasz Sowiński, prof. IF PAN
Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk
Aleja Lotników 32/46, 02-668 Warszawa
tomasz.sowinski@ifpan.edu.pl

Warszawa, 19 grudnia 2017 r.

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgra Arkadiusza Kurosia pt.
„Splątanie jako charakterystyka stanów układu kilku cząstek
w pułapce kwantowej”**

Przedłożona do recenzji rozprawa doktorska mgra Arkadiusza Kurosia została przygotowana pod kierunkiem pani prof. dr hab. Anny Okopińskiej, napisana jest w języku polskim i obejmuje nieco ponad 80 stron maszynopisu. Praca jest podzielona na dziewięć rozdziałów (w tym wstęp i podsumowanie) oraz bibliografię zawierającą 76 pozycji. Zgodnie z obowiązującymi regulacjami prawnymi rozprawa opatrzona jest również streszczeniem w języku angielskim. Dysertacja oparta jest na oryginalnych wynikach naukowych, które zostały zawarte w pięciu artykułach opublikowanych w latach 2011-2016 w czasopismach z listy filadelfijskiej. We wszystkich tych publikacjach mgr Arkadiusz Kuroś jest pierwszym autorem. Co jest warte podkreślenia, prace te mają nie więcej niż trzech autorów.

Rozdział I rozprawy to wstęp, w którym Autor krótko wprowadza czytelnika w problematykę pracy i formułuje główny jej cel. Jest napisany jasno i klarownie aczkolwiek pewien niedosyt odczuwam ze względu na brak bezpośredniego nawiązania do doświadczalnych realizacji w obrębie fizyki ultrazimnych gazów. Takie nawiązanie mogłoby zwrócić uwagę czytelnika na wagę podejmowanych zagadnień.

Rozdział II dotyczy numerycznej implementacji metody wariacyjnej Rayleigha-Ritza. Zaprezentowany jest numeryczny sposób optymalizacji tej metody prowadzący do efektywnego znajdowania stanów związanych jednocząstkowego równania Schrödingera. Wykorzystując jako przykład model sprzężonego dwuwymiarowego oscylatora harmonicznego Autor porównuje ze sobą różne strategie optymalizacyjne. Najmniej jasny jest dla mnie sposób porównania różnych metod w oparciu o czas pracy procesora. Jest to sposób bardzo techniczny i nie ułatwia wyrobienia sobie odpowiedniej intuicji fizycznej. Tym bardziej, że dokładność metody określona jest jedynie poprzez analizę zbieżności energii własnych. Autor nie wspomina natomiast nic o wierności odtworzenia funkcji falowej.

Rozdział III poświęcony jest stanom rezonansowym i ich opisie w ramach mechaniki kwantowej. Taki opis nie jest łatwy, bo choć stany te pełnią kluczową rolę w najróżniejszych procesach fizycznych, to nie mogą być ściśle matematycznie opisane w naturalnym języku kwantowo-mechanicznym, tj. jako stany całkowalne z kwadratem rozpinające przestrzeń Hilberta układu. Jak przypomina Autor analiza tych stanów jest jednak możliwa w formalizmie tzw. niehermitowskiej mechaniki kwantowej, którą otrzymuje się poprzez nieunitarną transformację polegającą na zespolonym obrocie współrzędnych. W takim opisie stany rezonansowe są

traktowane na równi ze stanami związanymi, a jedyna różnica między nimi objawia się w istnieniu niezerowej urojonej części energii własnej stanów rezonansowych. Jest ona interpretowana jako odwrotność czasu życia. Cały rozdział czyta się bardzo przyjemnie, gdyż jest napisany przejrzyście i pedagogicznie z odpowiednim zwróceniem uwagi na różne subtelności matematyczne.

W całej tej dyskusji bardzo brakuje mi jedynie omówienia problemu diagonalizowalności niehermitowskiego hamiltonianu H_θ , otrzymanego przez zespolony obrót. Czy diagonalizowalność H_θ musi być zapostulowana czy być może mogłaby być w pewnych przypadkach udowodniona? Chętnie wysłuchałbym opinii Autora na ten temat. Inne pytanie, które nasuwa się po lekturze tego rozdziału jest związane z dwuczasową funkcją korelacji (3.7). Nie jest do końca dla mnie jasne dlaczego wielkość ta jest interpretowana jako prawdopodobieństwo tego, że cząstka nie przetunelowała poza obszar potencjału. Jest to raczej prawdopodobieństwo tego, że po czasie t cząstka pozostaje w stanie początkowym. W ogólności te dwie wielkości nie są równoważne, bo w wyniku ewolucji cząstka może pozostawać studni w stanie ortogonalnym do stanu początkowego. Czy w związku z tym własności wielkości $P(t)$ opisane poniżej wzoru (3.7) są cechą jedynie tej konkretnej dwuczłonowej funkcji korelacji, czy być może można je również odnaleźć w czasowej zależności faktycznego prawdopodobieństwa tego, że cząstka znajduje się w obszarze pułapkowania?

Niespełna dwustronicowy Rozdział IV to krótkie przypomnienie metody Hartree-Focka dla układów kilku oddziałujących nierozróżnialnych cząstek oraz jego uogólnienie na przypadek ansatzu zawierającego jawną zależność przestrzenną między nimi. Rozdział V natomiast jest streszczeniem ogólnej wiedzy o splątaniu kwantowym i sposobach jego kwantyfikowania w przypadkach wielociałowych. Za najbardziej wartościową część tego fragmentu rozprawy należy uznać wyeksponowanie, że w przypadku cząstek nierozróżnialnych (fermionów) w układzie zawsze istnieją nieklasyczne korelacje między podukładami, które są bezpośrednią konsekwencją statystyki kwantowej. W sensie fizycznym korelacje te nie mogą być uznawane za splątanie kwantowe, choć mają wszystkie jego matematyczne własności. Jest to fakt znany w literaturze, ale wydaje mi się, że jego niezrozumienie jest dość powszechne wśród naukowców niezajmujących się bezpośrednio badaniem korelacji. Dlatego doceniam to, że mgr Kuroś podkreślił ten fakt w swojej rozprawie.

Rozdział VI stanowi w mojej ocenie centralny punkt rozprawy, w którym mgr Kuroś omawia uogólnienie znanych z mechaniki kwantowej pojęć takich jak zredukowany operator gęstości, rozkład Schmidta, czy entropowe miary korelacji na przypadek stanów rezonansowych opisywanych w formalizmie mechaniki niehermitowskiej. Dzięki temu, że Autor omawia wszystkie te pojęcia w najdrobniejszych szczegółach czytelnik ma możliwość wyrobienia sobie intuicji, bez których zrozumienie wyników w dalszych rozdziałach byłoby bardzo trudne lub wręcz niemożliwe. Przy czytaniu tego rozdziału wyczuwalna jest jednak pewna matematyczna ostrożność Autora. Mam tu na myśli choćby problem diagonalizowalności macierzy e^R oraz e^L , której zapostulowanie prowadzi Autora do zależności (6.7) i (6.8). Takie przedstawienie zagadnienia jest oczywiście prawidłowe, ale niepotrzebnie sugeruje, że wynik jest mniej ogólny niż jest w istocie. Wydaje się bowiem, że do udowodnienia tych zależności nie jest wcale niezbędna diagonalizowalność

macierzy e^R oraz e^L , a wystarczy ich rozkładalność na wartości singularne (SVD), którą posiadają wszystkie macierze. To oznaczałoby, że rozkład Schmidta na stany podukładów jest zawsze możliwy i postulowanie diagonalizowalności nie jest potrzebne.

Rozdział VII poświęcony jest badaniom własności układu dwóch oddziałujących elektronów umieszczonych w prawie jednowymiarowej kropce kwantowej. Po zdefiniowaniu modelowego hamiltonianu (7.8) autor stosuje całą potęgę formalizmu wyjaśnionego we wcześniejszych rozdziałach zarówno dla stanów związanych jak i stanów rezonansowych. Jednym z najważniejszych wyników jest znalezienie krytycznej długości podłużnej β w funkcji uwięzienia poprzecznego ℓ_{\perp} , a także głębokości kropki V_0 . To pozwala wykreślić diagram fazowy w płaszczyźnie (β, V_0) z wyraźną granicą pomiędzy sytuacjami, w których stan układu jest związany albo rezonansowy.

W końcowej części tego rozdziału Autor przedstawia alternatywny sposób na opis oddziałujących dwóch elektronów w prawie jednowymiarowej kropce kwantowej. Jest on inspirowany spostrzeżeniem, że nie zawsze znana jest funkcja falowa w kierunku prostopadłym i w związku z tym nie jest możliwe bezpośrednie wyznaczenie efektywnej postaci potencjału oddziaływania. Autor proponuje stosowanie zregulowanego jednowymiarowego potencjału kulombowskiego, który (po odpowiednim dobraniu parametru regularyzacji) ma wszystkie potrzebne cechy dokładnego potencjału efektywnego. Stosując takie podejście Autor z sukcesem bada jak dobrze taki przybliżony opis przewiduje własności układu i przeprowadza pełną analizę korelacji pomiędzy elektronami. Czuję w tym miejscu pewien niedosyt literaturowy. Przybliżanie oddziaływania kulombowskiego jego jednowymiarową, zregulowaną wersją pojawia się w literaturze bardzo często, a jego źródła należy doszukiwać się w klasycznych pracach grupy J. H. Eberly'ego z początku lat 90 ubiegłego wieku (Phys. Rev. A **44**, 5997 (1991), Phys. Rev. Lett. **68**, 2905 (1992), Phys. Rev. A **47**, R1605 (1993), Phys. Rev. A **50**, 378 (1994), itd...). Szkoda, że Autor nie odniósł się do tych prac w żadnym miejscu. W mojej ocenie, otrzymane przez Autora wyniki są bowiem bardziej istotne dla szerokorozumianego środowiska fizyków atomowych niż to wynika z treści rozprawy.

W przypadku Rozdziału VII mam jedną uwagę merytoryczną. Już na pierwszy rzut oka widoczna jest pewna nieścisłość pomiędzy rysunkami 7.3 i 7.4. Jak słusznie argumentuje Autor, na wykresie 7.3 punkt przecięcia czerwonej krzywej przerywanej z energią rozważanego stanu definiuje krytyczną wartość parametru β , dla którego stan przestaje być rezonansowy. Dokładnie dla tej wartości parametru β odwrotność czasu życia Γ prezentowana na wykresie 7.4 powinna osiągać wartość 0. Porównując oba rysunki widać, że tak nie jest. Np. dla pomarańczowej linii krytyczna wartość β z rysunku 7.3 zdecydowanie przewyższa 2, a na rysunku 7.4 tej wartości nie osiąga. Takie same nieścisłości są widoczne również na analogicznych wykresach z rysunku 7.13 dla modelu jednowymiarowej kropki kwantowej z potencjałem zregulowanym. Jakie jest wyjaśnienie tych rozbieżności i jaki ma to wpływ na pozostałe wyniki przedstawione w rozprawie?

W Rozdziale VIII rozważane są korelacje międzyelektronowe w nierelatywistycznym modelu atomu helu w granicy nieskończenie ciężkiego jądra. Dzięki zastosowaniu formalizmu zespolonego

obrotu dogłębnie przeanalizowane są stany podwójnie wzbudzone, a wyniki porównane z innymi wcześniej znanymi w literaturze. Jeśli chodzi o energię stanów wzbudzonych i ich czas życia to otrzymane przez mgra Kurosia wyniki są w pełni zgodne zarówno z wynikami teoretycznymi uzyskanymi innymi metodami jak i z klasycznymi danymi eksperymentalnymi (J. Phys B **9**, 1739 (1976)). Inaczej jest jednak w przypadku entropowych miar korelacji, co do których nie było pełnej zgodności w literaturze. W szczególności chodzi tutaj o entropię von Neumanna w stanach $2s^{21}S^e$ i $2p^{21}S^e$. Z analizy przeprowadzonej przez Autora dość jasno wynika, że w pracy [75] (Phys. Rev. A **91**, 052301 (2015)) nie była prawdopodobnie poprawnie uwzględniona degeneracja ze względu na magnetyczną liczbę kwantową. Wyniki zaprezentowane w tym rozdziale są dla mnie jasnym potwierdzeniem, że zaproponowany przez mgra Kurosia formalizm mechaniki niehermitowskiej jest nie tylko poprawnym, ale przede wszystkim efektywnym narzędziem do analizowania kilkuciałowych stanów rezonansowych.

Pracę podsumowuje Rozdział IX, w którym Autor jeszcze raz przypomina najważniejsze wyniki dysertacji.

Rozprawa doktorska mgra Kurosia napisana jest bardzo starannie i czyta się ją z wielką przyjemnością. Przez całą pracę Autor prowadzi czytelnika od powszechnie znanych pojęć i koncepcji mechaniki kwantowej, uogólnia je na formalizm mechaniki niehermitowskiej, aby zastosować je do przeanalizowania własności stanów rezonansowych w rzeczywistych układach kwantowych. Całość jest dobrze skomponowana i bez wątplenia stanowi integralną całość w przedstawieniu problemu.

Przy całej staranności Autora nie udało mu się jednak uniknąć pewnych błędów edytorskich. Np. w równaniach (3.9) i (3.38) brakuje kwadratu przy pędach, a nadmiarowy jest znak „minus”. Odwrotnie jest w definicji potencjału (7.7) gdzie zapewne znaku minus brakuje. W definicji czasu życia tuż pod wzorem (3.3) nie zgadzają się jednostki, a zdanie tuż pod wzorem (3.22) nie jest dokończony. Zrozumienie rysunku 8.2 jest utrudnione poprzez bardzo skromny podpis zawierający jedynie referencję do pracy, z której został on zaczerpnięty, a na rysunku 7.1 nie jest określona wartość amplitudy potencjału V_0 , dla której rysunek został wykonany. Takich drobnych potknięć edytorskich w pracy jest więcej, ale nie wpływają one na czytelność wywodu.

Tak jak już wspomniałem wcześniej, moim zdaniem przedstawiona rozprawa mogłaby być ciekawie wzbogacona poprzez umieszczenie jej w znacznie szerszym kontekście niż tylko kontekst struktur półprzewodnikowych o różnych geometriach. Mam tu na myśli w szczególności całą gałąź inżynierii kwantowej opartej o fizykę ultrazimnych gazów przetrzymywanych w pułapkach optycznych. Dzięki niespotykanej w innych eksperymentach precyzji z jaką takie układy atomowe są przygotowywane, kontrolowane, a ich własności precyzyjnie mierzone pełnią one specyficzną funkcję symulatorów kwantowych dla problemów szeroko pojętej fizyki materii skondensowanej. W szczególności, ostatnie spektakularne eksperymenty pozwalające kontrolować układy kilku ultrazimnych atomów w prawie jednowymiarowych pułapkach optycznych o dowolnym wręcz kształcie mogłyby być doskonałą ilustracją dla przedstawionych w rozprawie wyników i tym samym praca mogłaby się odbić szerszym echem w środowisku międzynarodowym.

Przytoczone powyżej mankamenty rozprawy doktorskiej oczywiście nie mogą zmienić mojej pozytywnej opinii na temat przedstawionej dysertacji. Po jej lekturze jestem utwierdzony w przekonaniu, że mgr Kuroś dogłębnie rozumie omawiane problemy, gdyż potrafi je szczegółowo wyjaśnić z odczuwalną lekkością w formułowaniu wypowiedzi. Sam fakt podjęcia przez Autora tak subtelny problemu jak analiza korelacji w stanach rezonansowych zasługuje na docenienie. Jest to bowiem problem bardzo nietrywialny, wymagający szerokiego, popartego fizyczną intuicją spojrzenia na zjawiska kwantowe. Praca nie tylko wyjaśnia w szczegółach i implementuje zastosowany formalizm, ale również stawia otwarte problemy i zachęca do dalszego prowadzenia badań w tym kierunku.

Nie mam żadnych wątpliwości, że przedstawiona rozprawa doktorska mgra Arkadiusza Kurosia jest oryginalnym rozwiązaniem problemu naukowego i w związku z tym spełnia wszystkie formalne wymogi zawarte w obowiązujących regulacjach prawnych. W moim odczuciu spełnia ona również wszystkie wymogi zwyczajowe stawiane rozprawom doktorskim w zakresie fizyki teoretycznej. Dlatego z pełnym przekonaniem wnioskuję o dopuszczenie mgra Arkadiusza Kurosia do dalszych etapów przewodu doktorskiego w celu uzyskania stopnia naukowego doktora nauk fizycznych w zakresie fizyki.

A handwritten signature in blue ink, reading "Tomasz Jowitli". The signature is written in a cursive style with a long horizontal stroke at the beginning.