

**Prof. dr hab. Jacek Karwowski,  
Instytut Fizyki UMK;  
Grudziądzka 5; 87-100 Toruń**

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgra Arkadiusza Kurosia zatytułowanej  
“Splątanie jako charakterystyka stanów układu kilku cząstek w pułapce  
kwantowej” napisanej na Wydziale Matematyczno-Przyrodniczym Uniwersytetu  
Jana Kochanowskiego w Kielcach pod kierunkiem prof. dr hab. Anny Okopińskiej**

Tytuł pracy doktorskiej mgra Arkadiusza Kurosia, “*Splątanie jako charakterystyka stanów układu kilku cząstek w pułapce kwantowej*”, odpowiada treści rozprawy. W swojej pracy mgr Kuroś analizuje relacje pomiędzy wartościami indeksów będących miarami korelacji kwantowych, a parametrami charakteryzującymi potencjały ograniczające ruch elektronów, dla różnych stanów układów dwu-elektronowych. Szczególną uwagę poświęca stosunkowo mało zbadanym stanom rezonansowym.

Zarówno tematycznie jak i metodycznie recenzowana praca stanowi fragment programu badawczego, którego celem jest adaptacja metod matematycznych mechaniki kwantowej do badania układów kilku cząstek w pułapkach kwantowych, a szczególnie, do badania efektów splątania kwantowego, który jest od szeregu lat rozwijany przez promotorkę, prof. Annę Okopińską.

Rozprawa doktorska jest 83-stronicowym maszynopisem. Składa się ze wstępu, siedmiu rozdziałów, podsumowanie i spisu literatury. Większość wyników została już opublikowana w pięciu publikacjach w dobrych czasopismach specjalistycznych: dwie w *Few Body Systems* (IF=0.9), i po jednej w *Physica Scripta* (IF=1.2), *Journal of Physics A* (IF=1.9) i *International Journal of Theoretical Physics* (IF=1.0). We wszystkich publikacjach A. Kuroś jest pierwszym autorem. W czterech przypadkach współautorką jest Anna Okopińska, w dwóch Przemysław Kościk i w jednym Jayanta Saha z Indian Association for the Cultivation of Science w Kolkacie.

Bibliografia zawiera 76 pozycji z czego 36 to prace nowe, które ukazały się w ostatnim dziesięcioleciu. Prac o znaczeniu historycznym, starszych niż 30 lat, znalazłem w spisie literatury 20. Taki rozkład czasowy cytowanej literatury świadczy o dobrej znajomości przez autora zarówno aktualnego stanu badań związanych z tematyką pracy doktorskiej, jak i podstaw z których ta tematyka się rozwinęła.

W krótkim Wstępie (Rozdział 1) autor określa cel prowadzonych przez siebie badań i przedstawia strukturę rozprawy. Szkoda, że autor nie umieścił we wstępie odnośników literaturowych do podstawowych zjawisk i pojęć diskutowanych w pracy doktorskiej. Jedyne (cztery!) odnośniki dotyczą pojęcia kropki kwantowej. Brak jest odnośników tłumaczących co to jest splątanie kwantowe, paradoks EPR, nierówności Bella, korelacje kwantowe, algorytmy kwantowe, komputery kwantowe, itp. Istnieje wiele doskonałych prac przeglądowych na te tematy i Wstęp mógłby być właściwym miejscem dla wskazania tych prac czytelnikowi i zademonstrowania, że autor rozprawy zna te prace.

W Rozdziale 2 wykazano skuteczność wariantu nieliniowej metody Rayleigha-Ritza (RR), w którym optymalizacji podlega ślad macierzy hamiltonianu. Na przykładzie dwu-wymiarowego

potencjału anharmonicznego autor pokazuje wyższość tej metody nad metodą dyskretyzacji stosowaną do tego potencjału przez innych autorów. Moim zdaniem opisy metody wariacyjnej i tradycyjnej metody RR, dobrze znane z podręczników, można było pominąć. Nie zgadzam się z autorem, że rozwinięcie (2.4) staje się dokładne dla  $M \rightarrow \infty$ . Aby rozwinięcie było dokładne, zbiór funkcji bazowych musi być zupełny, a układ nieskończony nie musi być zupełny. Np. usuwając ze zbioru  $x^n$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$  jedną z funkcji (np  $x^0$ ) otrzymujemy układ nieskończony, ale niezupełny, i np. rozwinięcie funkcji  $e^x$  w tej bazie będzie zawsze bardzo kiepskie. Zagadnienie własne hamiltonianu z dwu-wymiarowym potencjałem anharmonicznym autor rozwiązuje w dwóch różnych bazach funkcyjnych. Tylko jedna z nich ma poprawne własności asymptotyczne i dla tej bazy wyniki muszą być lepsze (w granicy bazy zupełnej będą dokładne). Dlatego niezrozumiały jest tryb przypuszczający w ostatnim zdaniu na stronie 11.

Bardzo interesujący jest Rozdział 3 poświęcony zastosowaniom nieliniowej metody wariacyjnej, stanowiącej modyfikację metody omówionej w poprzednim rozdziale, do badania stanów rezonansowych. W zwarty, dobrze zredagowany sposób, autor opisuje podstawowe własności stanów rezonansowych, podaje prosty, ściśle rozwiązywalny, przykład, omawia metodę obrotu zespolonego i jej zastosowanie do opisu stanów rezonansowych, formułuje metodę Rayleigha-Ritza dla niehermitowskiego hamiltonianu i reformuluje metodę optymalizacji śladu macierzy hamiltonianu w sposób umożliwiający zastosowanie jej w teorii stanów rezonansowych. Dla ilustracji omawianego formalizmu podaje dwa przykłady w których wyznacza numerycznie stany rezonansowe pojedynczej cząstki. Znaczna część tego rozdziału zawiera sformułowania oryginalne, wcześniej nieznanne. Stanowią one znaczną część publikacji w Journal of Physics A z roku 2013. Warto zaznaczyć, że tylko część wyników przedstawionych w tej publikacji znalazła się w rozprawie doktorskiej. Pewien niedosyt budzi dyskusja ostatniego przykładu. Stosowana jest tu baza funkcji, o których autor mówi że są to funkcje trygonometryczne, będące funkcjami własnymi hamiltonianu opisującego nieskończoną studnię potencjału o szerokości  $L$ . W dyskutowanym przykładzie parametr  $L$  jest urojony. Powoduje to, że funkcje bazowe są kombinacjami iloczynów funkcji eksponencjalnych i trygonometrycznych. Całe zagadnienie jest nietrywialne i wymagałoby nieco szerszej dyskusji.

Następny rozdział, czwarty, jest krótkim referatem w którym naszkicowane są standardowe metody stosowane od ponad pół wieku do wariacyjnego rozwiązywania  $N$ -cząstkowego równania Schrödingera. Nie bardzo rozumiem czym kierował się autor pisząc ten rozdział. Stopień szczegółowości opisu odpowiada podręcznikowi chemii kwantowej dla 2-go lub 3-go roku studiów magisterskich. Gdyby chodziło o ułatwienie znalezienia odpowiedniej literatury czytelnikowi, który mógłby zapomnieć na czym poszczególne metody polegają, należało podać odnośniki do literatury. Tymczasem jedyną pracą cytowaną w tym rozdziale jest praca Hylleraasa z 1929 roku. Moim zdaniem rozdział ten jest całkowicie zbyteczny.

Rozdział 5 rozpoczyna część pracy doktorskiej poświęconą korelacjom kwantowym. Autor definiuje w nim podstawowe pojęcia takie jak splątanie kwantowe, zredukowany operator gęstości, rozkład Schmidta, naturalne orbitale, entropowe miary splątania. Następnie nieco bardziej szczegółowo dyskutuje splątanie w układzie dwu-elektronowym. Jest to uzasadnione, bowiem badanie własności takich właśnie układów jest przedmiotem dalszej części pracy. Dla mnie opis przedstawiony w tym rozdziale jest zbyt lakoniczny, a definicje za mało sformalizowane. Brakuje kilku odnośników literaturowych, które byłyby bardzo pomocne dla czytelnika, który nie zajmuje się w swojej codziennej pracy informatyką kwantową. Zdziwiło mnie, że brak jest odnośnika

do bardzo interesującej i zawierającej dużą ilość istotnych informacji pracy Anny Okopińskiej z J. Phys: Conference Series, 2010, zatytułowanej *Correlation and entanglement measures in trapped few-particle systems*. Brakuje choćby krótkiej dyskusji na temat bezpośredniej relacji pomiędzy rozwinięciem macierzy gęstości w bazie naturalnych orbitali, wprowadzonym w 1955 przez P. O. Löwdina w jego słynnej pracy w Phys. Rev. z 1955 (to właśnie tam po raz pierwszy użyto nazwy *orbitale naturalne*), a wykorzystywanym przez autora rozkładem Schmidta. Warto byłoby powiedzieć choćby dwa zdania na temat związków pomiędzy korelacją elektronową, wielkością o fundamentalnym znaczeniu w teorii układów wieloelektronowych, a splątaniem kwantowym. Istnieje spora literatura na ten temat. Na przykład: Z. Huang *et al.* Journal of Modern Optics 53 (2006) 2543, *Entanglement and electron correlation in quantum chemistry calculations*; R. O. Esquivel *et al.*, EPL, 111 (2015) 40009, *Correlation energy as a measure of non-locality: Quantum entanglement of helium-like systems*; C.L. Benavides-Riveros *et al.*, PRA 95 (2017) 032507, *Relating correlation measures*.

Ponieważ funkcje falowe stanów rezonansowych nie są kwadratowo całkowne, metody opisu stopnia splątania i określenia miar korelacji kwantowych w tych stanach są inne niż w stanach związanych. Opisowi korelacji kwantowych w stanach rezonansowych poświęcony jest kolejny, szósty, rozdział pracy doktorskiej. W szczególności, autor pokazuje w jaki sposób niehermitowskość hamiltonianu i transformacja obrotu zespolonego wpływają na strukturę zredukowanego operatora gęstości i na rozkład Schmidta. Podobnie jak wcześniej dla stanów związanych, również tu, szczególną uwagę zwraca na przypadek dwu-elektronowy. Następnie wprowadza entropowe miary korelacji stosowalne w przypadku stanów rezonansowych, w tym miary zespolone. Praktyczne zastosowania tych miar pokazuje na przykładzie ściśle rozwiązywalnego modelu dwóch bezspinowych cząstek dla których potencjał oddziaływania jest formą kwadratową ich współrzędnych. Dyskusja otrzymanych wyników jest bardzo skromna - w zasadzie sprowadza się do stwierdzenia, że na obecnym etapie badań nie potrafimy odpowiedzieć na pytanie, czy i kiedy zespolone entropie nadają się do opisu korelacji kwantowych. Raporty z analiz korelacji kwantowych w stanach rezonansowych były publikowane przez kilka grup badawczych. Między innymi, bardzo interesująca jest praca F. M. Ponta i współpracowników z roku 2010 (cytowana jako [49]). Niestety, dyskusja różnic pomiędzy podejściem prezentowanym w rozprawie doktorskiej, a tymi które są dostępne w literaturze, jest bardzo lakoniczna.

Rozdział 7 jest poświęcony analizie własności silnie anizotropowych, w granicy jednowymiarowych, dwu-elektronowych kropek kwantowych. Ze względu na nietrywialne przejścia graniczne, tego rodzaju układy są interesujące z teoretycznego punktu widzenia. Mogą stać się również ważnymi obiektami badań doświadczalnych. Dlatego szczegółowy opis zależności struktury energetycznej tych układów od wartości opisujących je parametrów jest zadaniem godnym szczególnej uwagi. Rozdział napisany jest w sposób dobrze przemyślany i staranny. Po zdefiniowaniu ogólnego modelu teoretycznego, wprowadzeniu kwazi-jednowymiarowego przybliżenia, gaussowskiej studni potencjału wiążącej elektrony w kierunku podłużnym i kwazi-jednowymiarowego potencjału efektywnego opisującego oddziaływanie elektronów, autor określa zakres stosowności tego przybliżenia oraz wyprowadza warunek istnienia dwu-elektronowego stanu związanego. Kropka kwantowa jest w tym modelu scharakteryzowana trzema parametrami: jeden opisuje jej szerokość, a dwa kształt potencjału podłużnego. Bardzo ciekawa jest analiza zależności energii stanu podstawowego, granic stabilności układu, położeń i szerokości rezonansów, od wartości tych parametrów. Do badania korelacji kwantowych w przypadku związanego stanu podstawowego autor używa entropii liniowej. W przypadku sta-

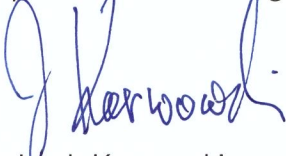
nu rezonansowego stopień korelacji określa przy pomocy dwóch wielkości: znormalizowanej entropii liniowej i części rzeczywistej zespolonej entropii liniowej. Z analizy zależności obu tych wielkości od parametrów układu wyprowadza wniosek, że pierwsza z nich jest bardziej przydatna do opisu korelacji. Brak jest jednak jakiegokolwiek uzasadnienia formalnego dla tego wniosku. W drugiej części tego rozdziału autor dyskutuje przypadek, w którym jako efektywny potencjał oddziaływania elektronów wybiera regularyzowany potencjał kulombowski.

Ostatni rozdział pracy poświęcony jest badaniu korelacji kwantowych w dwu-wzbudzonych metastabilnych stanach atomu helu. W szczególności, autor oblicza entropie zespolone i znormalizowane. W oparciu o ich wartości liczbowe dochodzi do wniosku, że zarówno części rzeczywiste zespolonych entropii jak i entropie znormalizowane mają rozsądne wartości i w związku z tym mogą być stosowane do opisu splątania w stanach rezonansowych helu. Ten wniosek nie jest poparty żadnymi rozważaniami formalnymi. Brak jest również próby interpretacji faktu, że w przypadku wcześniej badanych układów wnioski były inne.

Jak niemal każda praca doktorska, również ta, nie jest wolna od różnego rodzaju niezręcznych sformułowań, literówek, pomyłek gramatycznych. Ponieważ niemal cały zawarty w niej materiał został już opublikowany, sporządzanie listy tych pomyłek nie ma głębszego sensu. Warto może zwrócić uwagę na jeden szczegół techniczny. W przypadku, kiedy kilka różnych terminów ma to samo znaczenie, należy wybrać jeden i konsekwentnie go stosować w całej pracy. Na przykład, trzeba się zdecydować czy mówimy 'rozkład Schmidta' czy 'dekompozycja Schmidta'; czy 'diagonala macierzy' czy 'przekątna macierzy', itd.

W konkluzji stwierdzam, że w swojej rozprawie doktorskiej mgr Arkadiusz Kuroś przedstawił oryginalne rozwiązanie zagadnienia naukowego oraz wykazał swoją ogólną wiedzę w dziedzinie fizyki kwantowej. Ponadto zademonstrował, że posiadał umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej. Nie zauważyłem w jego doktoracie żadnych istotnych błędów. Moje krytyczne uwagi mają charakter subiektywny, związany z moimi upodobaniami naukowymi i zakresem mojej wiedzy - chciałbym, aby było więcej napisane o tym czego nie wiem, a mniej o tym co jest mi dobrze znane od dawna. Tym samym, recenzowana rozprawa doktorska spełnia bez żadnych zastrzeżeń wszystkie warunki określone w artykule 13 rozdziału 2, ustawy z dnia 14 marca 2003 roku, ze zmianami z dnia 21 kwietnia 2017 roku, o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki. Praca zawiera dużą ilość istotnie nowych wyników. Są one zestawione w kończącym rozprawę Podsumowaniu. Większość z nich została już opublikowana w pięciu artykułach w dobrych, recenzowanych, czasopismach. Dlatego uważam, że ustawowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim są w tym przypadku spełnione z nadmiarem.

W związku z powyższym wnoszę o dopuszczenie mgra Arkadiusza Kuroś do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



Jacek Karwowski  
Profesor fizyki teoretycznej

Toruń, 4 stycznia 2018