

2017 -05- 0 4

UNIWERSYTET M. CURIE – SKŁODOWSKIEJ

Tel: (+48) 81 – 537 62 41
Fax: (+48) 81 – 537 61 91
Email: doman@kft.umcs.lublin.pl
Web: <http://kft.umcs.lublin.pl/doman>

Prof. dr hab. Tadeusz Domański
Zakład Teorii Fazy Skondensowanej
Instytut Fizyki UMCS w Lublinie

Lublin, 18 kwietnia 2017 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Jaromira Jarosława Panasa
pt. „Investigation of the Bose-Hubbard model using
dynamical mean-field theory”

Praca doktorska pana Jaromira J. Panasa została wykonana w Instytucie Fizyki Teoretycznej na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego. Promotorem rozprawy jest prof. dr hab. Krzysztof Byczuk, funkcję promotora pomocniczego pełniła natomiast dr Anna Kauch. Rozprawa doktorska ma charakter teoretyczny. Od strony metodologicznej stanowi ona cenny przykład zastosowania dynamicznego pola średniego do analizy silnie skorelowanych układów bozonowych. Doktorant opracował nietrywialny sposób rozwiązywania zagadnienia oddziałującej domieszki kwantowej sprzężonej do rezerwuaru (dynamicznego pola Weissa) przy pomocy kwantowych symulacji Monte Carlo bez dyskretyzacji osi czasowej (*CT-QMC*). Somozgodną procedurę dynamicznego pola średniego zastosował do 3-wymiarowego modelu Bose-Hubbarda oraz do 2-wymiarowej wersji tego modelu rozszerzonego na dalekozasięgowe oddziaływania typu gęstość-gęstość. Zagadnienia te są istotne z poznawczego punktu widzenia i mają konkretne odniesienie do eksperymentów realizowanych w ultrazimnych gazach atomowych na sieciach optycznych.

Zasadnicza część wyników uzyskanych przez mgr. Panasa została opublikowana w artykułach *Phys. Rev. B* **92**, 045102 (2015) oraz *Phys. Rev. B* **95**, 115105 (2017). Przedłożona rozprawa doktorska przedstawia systematyczny opis strony metodologicznej i fizycznych aspektów badanych układów. Jest napisana w języku angielskim i składa się z rozdziałów wstępnych (1-2), szczegółowego opisu metody CT-QMC (3), dyskusji stanów kwantowych w wybranych modelach (4-5), podsumowania (6), dodatków (A-D) oraz spisu literatury (106 referencji).

Rozdziały 1 i 2 mają charakter wprowadzający. Doktorant nakreślił w nich cel badań oraz przedstawił zarys metodologii opartej na podejściu dynamicznego pola średniego (DMFT). Przedmiotem przeprowadzonej analizy teoretycznej były układy cząstek typu bozonowego, oddziałujące poprzez lokalny potencjał odpychający. Ten bozonowy wariant modelu Hubbarda cieszy się w ostatnich latach dużą popularnością w kontekście ultrazimnych gazów atomowych na sieciach optycznych, gdzie (zależnie od warunków fizycznych) mogą realizować się: stan izolatora Motta, nadciekłość, uporządkowanie ładunkowe, czy tzw. faza *supersolid*. Do opisu zjawisk korelacyjnych Doktorant zastosował bozonową wersję dynamicznego pola średniego (B-DMFT), która w granicy nieskończonego wymiaru (liczby koordynacyjnej) staje się metodą ścisłą. Zarys procedury został przedstawiony w podrozdziale 2.3. Idea podejścia polega na uwzględnieniu fluktuacji dynamicznych, redukując wyjściowe zagadnienie fizyczne do problemu skorelowanej domieszki sprzężonej z efektywnym polem Weissa $\Delta(\tau)$. W przypadku układów bozonowych z uwzględnieniem kondensacji Bosego-Einsteina (gdzie dochodzi do pojawienia się zespolonego parametru porządku) procedura samozgodnych obliczeń wymaga wprowadzenia spinorowej notacji Nambu. Ogólny schemat wyznaczania parametru porządku i dynamicznego pola Weissa zilustrowano na rysunku 2.2. Doktorant przedstawił też uogólnienie procedury B-DMFT na przypadek układu, w którym symetria translacyjna jest częściowo zredukowana (analogicznie do uporządkowania antyferromagnetycznego realizującego się na dwóch naprzemiennych podsieciach). W takim przypadku warunek samouzgodnienia dotyczy dwóch składników pola Weissa i zespolonego parametru porządku.

W trzecim rozdziale pracy Doktorant opisał szczegóły metod rozwiązania problemu skorelowanej domieszki kwantowej sprzężonej do rezerwuaru Weissa. W tym celu dla układów fermionowych opracowano różne techniki (tzw. *solvers*), bazujące na procedurach numerycznych (ED, NRG, QMC) lub popularnych przybliżeniach wielociałowych (LCE, NCA, IPT). Większość tych metod zadaptowano w ostatnich kilku latach do badania układów bozonowych. Było to trudne zadanie, ponieważ (w odróżnieniu od fermionów) przestrzeń Hilberta układów bozonowych jest nieograniczona. W obecnej pracy doktorskiej równania dynamicznego pola średniego rozwiązywano przy pomocy kwantowej metody Monte Carlo bez dyskretyzowania skali czasowej. Taki algorytm CT-QMC (*continuous time quantum Monte Carlo*) wprowadzili dla fermionów w 1998 roku Prokofiev, Svistunov i Tupitsyn [Ref. 49] natomiast wariant bozonowy opracowali w 2011 roku P. Anders *et al* [Ref. 40]. Doktorant przedstawił techniczne aspekty tego algorytmu, omawiając: poszczególne kroki procedury markowskiej (rysunek 3.1), schemat obliczania statycznych observabli (średniego obsadzenia, energii kinetycznej przypadającej na węzeł i parametru porządku) a także procedurę wyznaczania dynamicznych wielkości poprzez zastosowanie przedłużenia analitycznego w różnych schematach metody maksymalnej entropii.

Kolejny rozdział pracy dotyczy właściwości fizycznych modelu Bose-Hubbarda dla trójwymiarowej sieci kubicznej. Wstępne fragmenty tego rozdziału opisują wyniki uzyskane

przy pomocy przybliżenia słabo oddziałujących bozonów i perturbacyjnego rozwinięcia względem granicy atomowej. Pierwszy z wymienionych przypadków podkreśla kluczową rolę kondensacji Bosego-Einsteina i oddziaływań do pojawienia się w granicy niskoenergetycznej (czyli długofalowej $q \rightarrow 0$) kolektywnego modu Goldstone'a, który jest cechą charakterystyczną fazy nadciekłej. Stwierdzono również nieznaczny udział stanów bozonowych poniżej potencjału chemicznego, co jest niewątpliwie konsekwencją mieszania stanów cząstkowych z dziurowymi na poziomie przybliżenia Bogoliubova. W skrajnie przeciwnym przypadku punktem wyjścia było natomiast ściśle rozwiązanie granicy atomowej ($t = 0$) i uwzględnienie procesów kinetycznych na poziomie rozwinięcia perturbacyjnego. Diagram fazowy efektywnego hamiltonianu, wyrażonego wzorem (4.2.4), przedstawiony we współrzędnych $(t/U, \mu/U)$ wykazuje charakterystyczne płaty (*lobes*) izolatora Motta. Kształt tych płatów był dyskutowany w literaturze na podstawie różnych metod, uwzględniających rolę efektów korelacyjnych. Doktorant przedstawił swoje wyniki w ramach podejścia dynamicznego pola średniego, które dla układu $\text{dim}=3$ należy traktować jako przybliżenie. Zaletą tego podejścia jest fakt, iż rola procesów kinetycznych i potencjał oddziaływania cząstek są uwzględniane poza schematem rachunku zaburzeniowego. Wyniki przedstawione na rysunku 4.4 dla pierwszego płata pokazują, że statyczne przybliżenie wyraźnie niedoszacowuje obszar fazy Motta.

Dalsza część rozdziału czwartego przedstawia zależność dyspersyjną oraz kształt diagonalnej (w reprezentacji Nambu) funkcji spektralnej, która niesie informację o wzbudzeniach jednocząstkowych w układzie. W ultrazimnych gazach atomowych taką funkcję można badać empirycznie za pomocą spektrometrii braggowskiej. Obliczenia B-DMFT wykazały, że w obszarze fazy Motta zależność dyspersyjna charakteryzuje się przerwą energetyczną. Przechodząc zaś do obszaru fazy nadciekłej przerwa ulega zamknięciu, wyłania się mod typu dźwięku kolektywnego i stany cząstkowe mieszają się z dziurowymi. Doktorant zbadał kształt funkcji spektralnej dla przypadku słabo oddziałujących bozonów $U/t = \frac{1}{2}$ (rysunek 4.7), uzyskując bliską zgodność z wynikami przybliżenia Bogoliubova. Jakościowo odmienne efekty stwierdził natomiast dla układu silnie oddziałujących cząstek $U/t = 100$. W fazie Motta przebieg funkcji spektralnej w pierwszej strefie Brillouina wykazuje dwie gałęzie wzbudzeń oddzielonych przerwą energetyczną, w przybliżeniu wynoszącą $U - 3zt$. Dla fazy nadciekłej liczba gałęzi wzbudzeń jednocząstkowych uległa podwojeniu ze znaczną redystrybucją wagi spektralnej. W granicy niskoenergetycznej (tzn. w pobliżu punktu Γ) dwie gałęzie wykazują liniowy mod kolektywny, zaś wzbudzenia cząstkowe wyraźnie ulegają wymieszaniu ze wzbudzeniami dziurowymi. Najbogatszą gamę efektów stwierdzono dla oddziaływań pośrednich. W tym przypadku Doktorant stwierdził jednak poważne różnice pomiędzy wynikami uzyskanymi metodą CT-QMC oraz LCE. Ewolucja funkcji spektralnej od stanu Motta do nadciekłego (zilustrowana na rysunku 4.11) wykazała bardzo interesujące zmiany realizujące się w zależności dyspersyjnej oraz poszerzeniu linii, co odpowiada za redukcję czasu życia kwazicząstek.

Zastanawiam się na ile podejście dynamicznego pola średniego jest wiarygodnym przybliżeniem do analizy dyspersji kwazicząstkowej w układzie $\text{dim}=3$ skoro energia własna jest wielkością lokalną (niezależną od kwazipędu $\mathbf{k}$). Z przebiegu linii dyspersyjnych widać, że gradient $\frac{d}{d\mathbf{k}}\varepsilon(\mathbf{k})$ poszczególnych gałęzi wzbudzeń jest niemal identyczny w wartości bezwzględnej i różni się przeciwnym znakiem, co formalnie jest konsekwencją niezerowych wyrazów pozadiagonalnych w energii własnej. Fizycznie jest to spowodowane mieszaniem stanów cząstkowych z dziurowymi. Byłoby dobrze, gdyby Doktorant przytoczył wyniki uzyskane innymi metodami z uwzględnieniem fluktuacji przestrzennych.

Rozdział piąty dyskutuje diagram fazowy i widmo wzbudzeń kwazicząstkowych modelu Bose-Hubbarda na dwuwymiarowej sieci kwadratowej. Zasadniczym celem tej analizy było zbadanie współzawodnictwa lokalnego oddziaływania odpychającego (preferującego równomierne rozmieszczenie bozonów w sieci) z dalekozasięgowym oddziaływaniem między naprzemiennymi podsieciami (indukującym uporządkowanie typu fali gęstości). Motywacją do zajęcia się tym zagadnieniem były pomiary doświadczalne [32,33] dla atomów typu bozonowego na kwadratowej sieci optycznej we wnęce optycznej, gdzie mod świetlny pośredniczył w oddziaływaniach dalekozasięgowych. Doktorant zbadał diagram fazowy na podstawie przybliżenia statycznego (rozdział 5.1.2), określając obszar występowania stanu nadciekłego, izolatora Motta, uporządkowania ładunkowego oraz fazy tzw. *supersolid*. Dla trzech linii przejścia (oznaczonych literami B, C, D na rysunku 5.1) zbadał ciągły lub nieciągły charakter przejść fazowych pomiędzy poszczególnymi typami uporządkowania. Wyniki te skonfrontował następnie z samouzgodnionymi obliczeniami B-DMFT dla kilku reprezentatywnych zestawów parametrów, stwierdzając istotny wpływ dynamicznych fluktuacji zaindukowanych oddziaływaniami dalekozasięgowymi. Ogólny kształt diagramu fazowego nie odbiegał znacząco od przewidywań przybliżenia statycznego, ale charakter przejść okazał się w większości przypadków nieciągły (z wyjątkiem przejścia między stanem Motta i fazą *supersolid*). W ostatnim fragmencie rozdziału 5 Doktorant przedstawił porównanie widma energetycznego stanu z uporządkowaniem typu fali gęstości i fazy *supersolid*. Lokalne widmo pierwszej z nich charakteryzuje się trzema pikami kwazicząstkowymi o wyraźnie różnych wagach spektralnych poszczególnych podsieci. Widmo fazy *supersolid* jest o wiele bardziej skomplikowane, co szczególnie podkreśla postać funkcji spektralnej (rysunek 5.7). Wśród kilku gałęzi wzbudzeń jednocząstkowych Doktorant zauważył tendencję do wygenerowania kolektywnych modów Goldstone’a w zakresie niskoenergetycznym, które pochodzą z dynamicznych fluktuacji fazy parametru porządku. Niewątpliwie dynamiczne fluktuacje kwantowe odgrywają bardzo ważną rolę. W układach 2-wymiarowych równie (lub może jeszcze bardziej) istotne znaczenie mają jednak fluktuacje przestrzenne (np. kondensacja BE jest dla $\text{dim}=2$ możliwa tylko w temperaturze zera bezwzględnej natomiast przejście do fazy nadciekłej realizuje się tylko w sensie Kosterlitz’a-Thouless’a). Zbadanie takich fizycznych aspektów wykraczało poza ramy obecnej pracy doktorskiej.

W podsumowaniu stwierdzam, że mgr Jaromir J. Panas przeprowadził ciekawą analizę właściwości fizycznych skorelowanych układów bozonowych. Równania dynamicznego pola średniego rozwiązał przy pomocy opracowanego przez siebie programu numerycznego, opartego na kwantowej metodzie Monte Carlo. Ten nietrywialny schemat obliczeniowy umożliwił zbadanie wpływu dynamicznych fluktuacji na zjawiska uporządkowania różnych faz kwantowych. Doktorant wykazał się znajomością problematyki, zarówno od strony metodologicznej (o czym świadczą rozdziały 2 i 3 pracy doktorskiej) jak też aktualnymi badaniami doświadczalnymi i teoretycznymi ultracienkich atomów typu bozonowego. Praca doktorska jest napisana klarownym językiem i starannie zredagowana. Zauważyłem jedynie nieliczne potknięcia językowe, które nie mają większego znaczenia dla pozytywnej oceny niniejszej pracy doktorskiej - nie będę więc ich wymieniał.

Rozprawa spełnia wszystkie zwyczajowe oraz ustawowe warunki stawiane rozprawom doktorskim w ustawie *o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki* z dnia 14 marca 2003 r. z późniejszymi zmianami. Niniejszym przekazuję więc wniosek do Rady Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego o dopuszczenie pana magistra Jaromira Jarosława Panasa do publicznej obrony pracy doktorskiej oraz dalszych etapów Jego przewodu doktorskiego.

Jacek Domański