

2017 -05- 04

Dr hab. Tomasz Zaleski
Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych
im. Włodzimierza Trzebiatowskiego
Polskiej Akademii Nauk we Wrocławiu
ul. Okólna 2
50-422 Wrocław

Wrocław, 26 kwietnia 2017

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Jaromira Panasa
pt. „Investigation of the Bose-Hubbard Model Using Dynamical Mean-Field Theory”**

Wstęp

Przedstawiona mi do recenzji praca doktorska mgr. Jaromira Panasa zatytułowana: „Investigation of the Bose-Hubbard Model Using Dynamical Mean-Field Theory” została wykonana na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego pod kierunkiem prof. dr. hab. Krzysztofa Byczuka oraz dr. Anny Kauch. Praca jest napisana w całości w języku angielskim.

Praca jest poświęcona teoretycznemu badaniu właściwości modelu Bose-Hubbarda przy użyciu metody dynamicznego pola średniego. Model użyty w pracy występuje w dwóch wariantach: z siecią trójwymiarową i oddziaływaniami krótkozasięgowymi (nawęzłowymi) oraz dwuwymiarową, dwudzielną z oddziaływaniami dalekozasięgowymi (o nieskończonym zasięgu). W obydwu przypadkach w pracy analizowane są własności statyczne modelu, które są odnoszone do wyników uzyskanych metodą statycznego pola średniego, oraz dynamiczne – jednocząstkowe funkcje spektralne oraz gęstości stanów.

Użyta w pracy metodologia to obliczenia numeryczne w oparciu o metodę dynamicznego pola średniego (DMFT), w której równania DMFT są rozwiązywane w oparciu o symulacje kwantowego Monte Carlo z czasem ciągłym (continuous-time quantum Monte Carlo – CT-QMC). Wymaga to zaproponowania sposobu próbkowania nieskończonej osi czasu. W tym przypadku wykorzystywany jest algorytm Metropolis oparty o łańcuchy Markova. W efekcie otrzymywane są diagramy fazowe modeli oraz funkcje spektralne, które mogą zostać porównane z eksperymentalnymi wynikami badań układów ultrachłodnych bozonów w sieciach optycznych, stanowiących dokładną i ściśle kontrolowaną doświadczalną realizację modeli analizowanych w pracy.

Celem pracy jest lepsze zrozumienie własności różnych stanów bozonowych wynikających ze współzawodnictwa pomiędzy energią kinetyczną cząstek, oddziaływaniami pomiędzy nimi oraz wpływem zewnętrznych pól. Cel ten jest oryginalny i dobrze wpisuje się w aktualne trendy badawcze, czego dowodem jest opublikowanie wyników rozprawy w dwóch regularnych pracach w Physical Review B.

Treść rozprawy

Rozprawa jest podzielona na 6 rozdziałów. Krótki wstęp zawiera opis motywacji autora do podjęcia badań nad modelem Bose-Hubbarda, który z jednej strony stanowi jeden z najprostszych modeli opisujących zachowanie silnie oddziałujących bozonów, z drugiej strony – pozwala na opis złożonych własności kwantowych układów wielociałowych, daje więc nadzieję na zrozumienie ich istoty. W tej części pracy sformułowany zostaje także jej główny cel, oraz krótko omówione są prezentowane dalej wyniki.

Następny rozdział zawiera omówienie układów fizycznych, w których możliwa jest realizacja analizowanych w pracy modeli: ultraciekłych atomów w sieciach optycznych, uzupełnionych o wnękę pozwalającą na zwiększenie zasięgu oddziaływań. Następnie wprowadzony zostaje model Bose-Hubbarda oraz krótko opisana metoda będąca podstawą obliczeń prezentowanych w pracy: DMFT.

Rozdział 3 poświęcony jest opisowi konstrukcji procedury rozwiązywania równań DMFT przy użyciu algorytmu kwantowego Monte Carlo z czasem ciągłym (CT-QMC). Część ta zawiera także szczegółowy opis użytego algorytmu Metropolis z omówieniem poszczególnych kroków łańcucha Markova oraz wyznaczeniem prawdopodobieństw ich wystąpienia i akceptacji – niezbędnymi do prowadzenia obliczeń Monte Carlo.

Rozdziały 4 i 5 są poświęcone prezentacji otrzymanych wyników na tle wcześniejszych obliczeń, głównie dokonanych prostszymi metodami, w szczególności przy użyciu statycznego pola średniego. W pierwszym z nich analizowany jest model Bose-Hubbarda na sieci kubicznej z oddziaływaniami ograniczonymi do pojedynczego węzła. W układzie tym mogą wystąpić dwie fazy: nadciekła (superfluid) oraz izolator Motta (dokładniej: stan normalny w przypadku niezerowej temperatury). Przedstawione są diagramy fazowe modelu z uwzględnieniem poprawek wnoszonych przez zastosowanie metody DMFT oraz jednocząstkowe funkcje spektralne i gęstości stanów. Szczególnie w przypadku opisu wzbudzeń w badanym układzie, autor stara się zanalizować otrzymane wyniki odnosząc je do prostszych metod, wskazując podobieństwa i rozbieżności. W rozdziale 5 model Bose-Hubbarda analizowany jest na sieci kwadratowej, jednak w tym przypadku oddziaływania międzycząstkowe mają nieskończony zasięg. Ponadto pojawia się naprzemienna modulacja tych oddziaływań, prowadząca do powstania sieci dwudzielnej (z bazą) oraz możliwości wystąpienia dodatkowych faz: fali gęstości oraz supersolid. Także w tym przypadku analizowane są diagramy fazowe, w szczególności poprawki wnoszone przez metodę DMFT oraz funkcje spektralne i gęstości stanów.

W rozdziale 6 znajduje się krótkie podsumowanie oraz wskazanie kierunków dalszych badań. Pracę zamyka 5 załączników oraz licząca 106 pozycji bibliografia.

Opinia o rozprawie

Rozprawa jest napisana w całości w języku angielskim. Co prawda w pracy znajdują się dość liczne błędy językowe, ale w żadnym z przypadków ich wystąpienia, nie miałem wątpliwości, co autor miał na myśli i co chciał przekazać, nie mają więc one merytorycznego znaczenia. Układ pracy jest logiczny, dzięki czemu autorowi udało się stworzyć zamkniętą całość. Na początku przedstawione są układy fizyczne, do których można odnieść później otrzymane wyniki, a następnie konsekwentnie wprowadzany jest model oraz metody jego analizy. Rozdziały prezentujące wyniki odnoszą je do wcześniejszych (prostszych) metod wskazując zalety i wady przyjętych w pracy rozwiązań. Ponadto praca zawiera bogatą listę odnośników literaturowych.

Mimo, że cele pracy nie są sformułowane zbyt szczegółowo, zarówno one same, jak i przedmiot badań dobrze wpisują się w aktualne światowe trendy badawcze. Świadczy o tym opublikowanie wyników uzyskanych w pracy w dwóch publikacjach w prestiżowym *Physical Review B*. Dorobek publikacyjny autora nie jest więc bardzo okazały, ale za to składa się z liczących się publikacji, których rezultaty niemal w całości zostały przeniesione do rozprawy doktorskiej. Ponadto stanowią one oryginalne rozwiązanie trudnego zagadnienia badawczego.

Obowiązkiem recenzenta jest jednak wskazanie niedociągnięć rozprawy, poniżej wymieniam więc te elementy, które wzbudziły moje wątpliwości, czy niedosyt:

1. Tak, jak stwierdziłem wcześniej, układ pracy jest logiczny i tworzy zamkniętą całość. Szkoda jednak, iż doktorant nie zdecydował się na nieco szersze ukazanie kontekstu badanego zagadnienia. Model Bose-Hubbarda znajduje się w obszarze zainteresowań od dawna i zaproponowano szereg metod jego analizy. W rozprawie doktorskiej znajduje to odzwierciedlenie w zasadzie tylko w jednym (pierwszym) akapicie rozdziału 4, gdzie wymienionych zostało kilka z nich wraz z odnośnikami literaturowymi. Mam świadomość, że tematem pracy jest badanie modelu Bose-Hubbarda przy użyciu konkretnej metody (DMFT) i ta z kolei jest odniesiona do statycznego pola średniego, ale mimo wszystko przedstawienie w zarysie ogólnego stanu wiedzy miałoby uzasadnienie.
2. O ile z punktu widzenia prezentacji wyników i zalet użytej metody układ pracy jest dobrze dobrany, o tyle sprawia sporo kłopotów recenzentowi przy ocenie dorobku samego doktoranta. Zwykle w rozprawach doktorskich samodzielnie otrzymane wyniki są wydzielone i przedstawione w części pracy (kilku rozdziałach). W tym przypadku jednak są one przemieszane z wynikami literaturowymi, prezentującymi prostszą metodę obliczeniową (statyczne pole średnie), lub tę samą, na której opiera się doktorant, ale inaczej zastosowaną (różniącą się metodą numerycznego rozwiązania równań DMFT). Sytuację, na szczęście, ratuje komentarz umieszczony w podsumowaniu, mówiący o tym, iż to doktorant stworzył program numeryczny, którym wykonane są obliczenia. Ponadto fakt, iż jest pierwszym autorem w obydwu publikacjach (złamana została kolejność alfabetyczna) jest dla mnie potwierdzeniem jego istotnej roli w ich powstawaniu.
3. Zarówno wyznaczenie, jak i analiza funkcji spektralnych w układach silnie oddziałujących jest zagadnieniem bardzo skomplikowanym. Sam autor stwierdza, iż tylko w ograniczonym zakresie można zrozumieć przebiegi tych funkcji opierając się na prostszych, intuicyjnych przybliżeniach (statycznym polu średnim). Z tego powodu czuję pewien niedosyt, że w pracy nie poświęcono nieco więcej uwagi tymże funkcjom np. poprzez:
 - a. analizę spełnienia reguł sumacyjnych: zarówno samej funkcji spektralnej $A(\omega)$ lub $A(k, \omega)$ lub $A(\omega)_{\text{BE}}$, co zapewne było badane przez autora, aby zweryfikować poprawność obliczeń;
 - b. śledzenie transferu wag spektralnych pomiędzy różnymi częściami widma w fazie uporządkowanej (oczywiście jeżeli czas prowadzenia obliczeń umożliwia prześledzenie zmian funkcji w miarę powolnego oddalania się od linii przemiany fazowej).
4. Z punktu widzenia przebiegu funkcji spektralnych największym mankamentem zastosowanej metody jest nieodtworzenie w stanie nadciekłym liniowej dyspersji i braku szczeliny energetycznej w okolicy punktu Γ ($k=0$) charakterystycznej dla modu Goldstone'a. Pojawia się zatem pytanie: w jakim zakresie niskoenergetyczne wzbudzenia są niewłaściwie opisywane przez metodę DMFT i czy ten fakt może wpływać np. na charakter samego przejścia fazowego (zmieniając jego rodzaj z ciągłego na nieciągłe).
5. Mam też wątpliwości dotyczące rozbicia funkcji spektralnych w przypadku modelu z dalekozasięgowym oddziaływaniem i siecią z bazą (rozdział 5) na dwie niezależne funkcje dla różnych typów węzłów. Czy eksperymentalnie istnieje możliwość rozróżnienia korelacji dla poszczególnych podsieci? Czy może z punktu widzenia porównania wyników teoretycznych z ew. danymi doświadczalnymi transformatę Fouriera należałoby prowadzić nie dla każdej podsieci osobno, a wprowadzając tylko jedną funkcję korelacyjną, w której obecność bazy prowadziłaby do zwielokrotnienia liczby pasm (i zmniejszenia strefy Brillouina)?
6. W wielu przypadkach wartości parametrów modeli pojawiające się w pracy nie mają podanych jednostek, w których zostały wyrażone. Część z nich jest przedstawiona jako wielokrotność energii oddziaływania (potencjał chemiczny), jednak pozostałe – nie (całka przeskoku, energia oddziaływania, temperatura).

Ponadto w pracy znajduje się pewna ilość drobnych mankamentów edytorskich, np. przy prezentacji wyników temperatura jest określana raz jako T (rozdział 4), a raz jako β (rozdział 5), w opisach wielu rysunków często brakuje wartości wszystkich parametrów modelu, dla których zostały uzyskane (np. całki przeskoku t na rys. 4.8, 4.9, 4.12, 4.13), a czasami podawane informacje są błędne (np. na rys. 4.11 oddziaływania mają być takie same, jak na lewym panelu rys. 4.10, gdy tymczasem ich kolejność jest odwrócona). Są to jednak błędy, których zwykle bardzo ciężko uniknąć w dłuższym i bardziej skomplikowanym tekście i na szczęście nie uniemożliwiają poprawnego prześledzenia toku myślenia zawartego w pracy.

Wymienione powyżej niedociągnięcia nie podważają jednak mojej pozytywnej oceny rozprawy. Zagadnienie, którego badania podjął się doktorant, jest bardzo skomplikowane i zmierzania się z nim skutecznie podjęto się niewiele grup badawczych na świecie. O wadze uzyskanych wyników najlepiej świadczy opublikowanie ich w *Physical Review B*. Ponadto użyta metoda wymagała na pewno bardzo istotnego wkładu pracy nad techniczną stroną realizacji obliczeń DMFT, co skromnie zostało w rozprawie sprowadzone do tylko jednego zdania komentarza.

Podsumowanie

W podsumowaniu stwierdzam, iż przedstawiona mi do recenzji rozprawa doktorska p. mgr. Jaromira Panasa spełnia wszystkie zwyczajowe i ustawowe wymogi stawiane pracom doktorskim i wnioskuję do Rady Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego o dopuszczenie p. Panasa do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Podstawa prawna: ustawa z dnia 14.03.2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. nr 65, poz. 595 z p. zm.) oraz rozporządzenie Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 22.09.2011 roku w sprawie szczegółowego trybu i warunków przeprowadzania czynności w przewodach doktorskich, postępowaniu habilitacyjnym oraz w postępowaniu o nadanie tytułu profesora (Dz. U. nr 204, poz. 1200).

Tomasz Zalewski