



Wrocław, 20 maj 2025 r.

dr hab. Jacek Herbrych

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wydział Podstawowych Problemów Techniki

Politechnika Wrocławska

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr João Pedro Vieira de Mendonça Santos pt.

"Studying strongly correlated hybrid quantum systems through quantum simulations and efficient numerical approaches"

Współczesna fizyka materii skondensowanej koncentruje się na badaniu silnie skorelowanych układów kwantowych, które wykazują złożone zjawiska emergentne. Te efekty wynikają ze zbiorowego zachowania wielu kwantowych cząstek i nie dają się bezpośrednio wywnioskować z równań opisujących pojedyncze cząstki. Przedłożona rozprawa doktorska stawia sobie na celu lepszy opis dwóch takich zjawisk dla systemów oddziałujących (dodatkowo) z bozonowymi stopniami swobody modelowanymi przez sprzężenie ze światłem (tzw. hybrid quantum systems - kwantowe systemy hybrydowe). Dwa konkretne typy układów analizowanych przez Doktoranta to oddziałujące elektrony w obecności oddziaływania elektron-fonon oraz oddziałujące spiny w obecności oddziaływania atom-światło. W systemach elektron-fonon, silne sprzężenie prowadzi do powstawania polaronów — kwazicząstek złożonych z elektronu i otaczającego go „obłoku” fononów (opisywanych modelem Fröhlicha czy jego uproszczona wersją, modelem Holsteina). Analogicznie, w systemach atom-światło pojawiają się polaritony — stany mieszane fotonów i wzbudzeń dipolowych (opisywanych modelem Dicke’a). Główne wyniki przedłożonej dysertacji to (i) analiza rozszerzonej wersji modelu Holsteina-Hubbarda, która uwzględnia zarówno oddziaływania elektron-elektron, jak i strukturę pasm fononowych, oraz (ii) rozszerzenie klasycznego modelu Dicke’a o oddziaływania spin-spin (np. ferromagnetyczne lub antyferromagnetyczne), które silnie wpływają na strukturę faz systemu i konkurują z oddziaływaniem światła.

Przed omówieniem oryginalnych wyników zawartych w pracy, odniosę się do samej rozprawy przedłożonej przez Doktoranta. Dysertacja została napisana w języku angielskim i składa się z 8 rozdziałów. Pracę rozpoczyna wstęp (I. *Introduction*) krótko opisujący silnie skorelowane układy elektronowe, kolektywne zjawiska przy ich oddziaływaniu ze światłem, oraz wyzwania w tej



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



Politechnika Wrocławska

Wydział Podstawowych Problemów Techniki

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

T: +48 71 320 25 79

wppt.ift@pwr.edu.pl
www.ift.pwr.edu.pl
www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Nr konta:
37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



klasie układów kwantowych. Rozdział ten zawiera również podsumowanie wyników, przedstawienie najważniejszych modeli omówionych w pracy, oraz metod użytych do ich analizy. Następne trzy rozdziały (II. *Light-matter Systems*, III. *Electron-phonon Systems*, oraz IV. *Gaussian and non-Gaussian states*), blisko połowa pracy, zawierają obszerne tło teoretyczne i rozwijają zagadnienia poruszone we wstępie. Tę część pracy zamyka rozdział V. *The Hybrid Method*, przedstawiający główne narzędzie numeryczne użyte do analizy wyników. Doktorant omawia hybrydową metodę łączącą podejścia numeryczne (density matrix renormalization group DMRG, dokładna diagonalizacja ED) z ansatzami wariacyjnymi (gaussowskimi GS i nie-gaussowskimi NGS). Symulacja układów silnie skorelowanych stanowi duże wyzwanie z uwagi na rozmiar przestrzeni Hilberta, który rośnie wykładniczo z wielkością układu. Problem jest szczególnie trudny w układach hybrydowych (fermionowo-bozonowych), takich jak elektron-fonon czy spin-foton analizowanych w pracy przez Doktoranta. Metody takie jak dokładna diagonalizacja, DMRG czy kwantowe Monte Carlo mają ograniczenia, zwłaszcza gdy należy uwzględnić wysokie liczby fononów lub fotonów. Biorąc to pod uwagę, główne narzędzie numeryczne użyte w pracy przez Autora bazuje na wariacyjnym podejściu Diraca-Frenkela-McLachlana (opisujące ewolucję stanów w przestrzeni Hilberta na podrozmaitości stanów próbnych), transformacji Langa-Firsova (umożliwiającej dekompozycję układu na "niezależne" podukłady elektronów i fononów/fotonów), oraz metody DMRG (do rozwiązywania efektywnego modelu "czysto" fermionowego lub spinowego). Niestety, można jedynie przypuszczać, że zarówno opisany wyżej algorytm, jak i jego implementacja jest jednym z nowych wyników zawartych w dysertacji Pana Mendonça. Może świadczyć o tym przygotowywana (nie wchodzące więc do dorobku naukowego) publikacja J. P. Mendonça, Y. Wang, K. Jachymski, "*A variational non-Gaussian approach to cavity QED with strongly interacting emitters*". Nie zostało to jednak jasno zaznaczone, co utrudnia komentarz nad (potencjalnie) nowymi wyniki z tego rozdziału.

Następne dwa rozdziały zawierają oryginalne wyniki przedstawione w dysertacji. Rozdział VI *Simulations of electron-phonon coupling models* bazuje na publikacji J. P. Mendonça, K. Jachymski, "*Quantum simulation of extended electron-phonon-coupling models in a hybrid Rydberg atom setup*", *Physical Review A* **107**, 032808 (2023). W tym rozdziale opisano dwa podejścia do symulacji modeli elektron-fonon: (1) Symulacje kwantowe z użyciem atomów Rydberga. W zaproponowanej platformie, atomy Rydberga tworzą sieć o określonej topologii



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



Politechnika Wrocławska

Wydział Podstawowych Problemów Techniki

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

T: +48 71 320 25 79

wppt.ift@pwr.edu.pl
www.ift.pwr.edu.pl
www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Nr konta:

37 1090 2402 0000 0006 1000 0434

21



(np. zig-zag), oddziałując ze sobą dipolowo. Tworzą one fononowe potencjały dla neutralnych atomów, które odgrywają rolę elektronów. Układ ten umożliwia symulację rozszerzonych modeli Holsteina–Hubbarda, a także badanie przejść fazowych i zjawisk topologicznych. (2) W drugiej części Autor proponuje hybrydowe podejście numeryczne. Rozważane są fazy układów takich jak fala gęstości ładunku (CDW) czy spinu (SDW), a także możliwość wystąpienia fazy metalicznej pomiędzy nimi. Hybrydowe podejście pozwala analizować wpływ parametrów modelu na strukturę fazową, uwzględniając realistyczne sprzężenia i dyspersje fononowe.

Rozdział VII. *Cavity QED with strongly interacting emitters* bazuje na preprintcie przygotowanym we współpracy z Yao Wang (Emory University, Atlanta, USA) zatytułowanym “*The role of exchange interactions in the superradiant phenomena*” [arXiv:2503.04961 (2024)]. Wyniki te rozszerzają wcześniejsze badania na modelem spin–foton z dodatkowymi oddziaływaniami wymiennymi (np. ferromagnetycznymi lub antyferromagnetycznymi) pomiędzy spinami. Przedstawiono adaptację metody hybrydowej do układów, gdzie część fotonowa traktowana jest wariacyjnie (jako stan gaussowski), natomiast część spinowa analizowana jest z użyciem metod z klasy dokładnej diagonalizacji. W efekcie uzyskuje się model Dicke–Heisenberga, który pozwala badać m.in. przejścia fazowe pomiędzy superradiacją a uporządkowaniem magnetycznym. Wyniki te otwierają drogę do badania złożonych zjawisk, takich jak współistnienie porządku spinowego i superradiacyjnego, wielofazowość, czy dynamiczne zmiany faz pod wpływem zewnętrznego pola. Pracę wieńczy podsumowanie zawarte w Rozdziale VIII.

Autor zasługuje na pochwałę za bardzo szczegółowy opis teoretyczny modeli na których bazują otrzymane wyniki. Rozdziały II i III zawierają dość dokładny, pedagogiczny rys wyprowadzeń analitycznych niezbędnych do otrzymania modelu Dicke’a oraz modelu Holsteina zaczynając od bardzo fundamentalnych rozważań. Podobnie Rozdział IV zawiera dokładny opis stanów Gaussowskich - konceptu niezbędnego do zrozumienia zaproponowanej metody numerycznej opisanej w Rozdziale V. Praca napisana jest ogólnie dobrym językiem (z minimalną ilością literówek, co jest trudne do uniknięcia przy dysertacji liczącej około 130 stron), pojęcia są dobrze wyjaśnione, a układ rozdziałów jest dobrze zaplanowany. Należy jednak zauważyć, że miejscami praca wydaje się pisana/edytowana w pośpiechu. M.in., odnośnienie się w tekście do nieistniejących paneli/danych na rysunkach [strona 66: Fig. 6.5(c), Fig. 6.5(d) nie istnieje; strona 86: Fig.



7.6(c), Fig. 7.6(d) nie istnieje choć legenda Rysunku 7.6 sugeruje inaczej; strona 91: legenda Rysunku 7.10 sugeruje istnienie paneli (c-d) których nie ma]. Błędy te utrudniają analizę tekstu (np., wspomniany brak danych dla porównania statycznego czynnika struktury w kierunku XX i ZZ na Fig. 7.6 oraz Fig. 7.10).

W odniesieniu do rozdziałów prezentujących oryginalne osiągnięcia badawcze (Rozdziały V-VII) mam kilka pytań na które proszę Doktoranta o odpowiedź w czasie publicznej obrony.

(1) W Rozdziale V Doktorant sugeruje (strona 57), że optymalizowany jest zbiór zwyczajnych równań różniczkowych [*“set of ordinary (or low-dimensional partial) differential equations”*]. Nie są dla mnie jasne szczegóły tej optymalizacji w kontekście konkretnych bozonowych podsystemów, t.j., Równanie 6.11 oraz Równanie 7.6.

Ponadto, przedstawione w Rozdziale 5.2.1 geometryczne podejście do wariacyjnej metody zależnej od czasu może być sformułowane przy pomocy stanów typu Matrix Product State (MPS), przynajmniej w kontekście “zwyczajnej” ewolucji kwantowych układów [t.j., J. Haegeman *et al.*, Physical Review Letters **107**, 070601 (2011) czy C. Lubich *et al.*, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications **34**, 470 (2013)]. Czy taka optymalizacja w języku MPS jest możliwa dla (pod)układów rozważanych w dysertacji?

(2) W pierwszej części Rozdziału VI Autor analizuje model Su-Schrieffer-Heger w który są możliwe topologiczne stany brzegowe. Ich istnienie jest sugerowane na Wykresie 6.2(b) i w Rozdziale 6.1.2. Czy te stany to faktycznie skorelowane stany brzegowe na krańcach systemu, czy “jedynie” zlokalizowane cząstki kwantowe na krańcach systemu?

(3) We wprowadzeniu Autor zauważa, że oddziaływanie ze światłem może umożliwić dalekozasięgowe oddziaływanie (strona 6: *“photon-mediated long-range spin-spin interactions achieved via coupling to light”*). W tym kontekście, jednowymiarowe modele dla których oddziaływanie jest daleko zasięgowe nie muszą spełniać twierdzenia Mermin-Wagnera (t.j., jest możliwe daleko zasięgowe uporządkowanie). Czy istnieje, i jeśli tak jaki jest, zakres parametrów (w szczególności dla modelu Dicke-Heisenberg) w którym taki scenariusz jest realizowany?

(4) Możliwe, że to tylko kwestia nomenklatury, ale na początku Rozdziału 6.2.3 Autor pisze, że w jednowymiarowych układach korelacje magnetyczne są



często opisywane w kategoriach fali gęstości spinowej, ze względu na twierdzenie Mermin–Wagnera. (strona 73: *“In one-dimensional systems, these magnetic correlations are often described in terms of a spin density wave (SDW), because of the Mermin–Wagner theorem.”*). Istnienie fali gęstości (ze skończoną, przestrzennie zależną, wartością $\langle \rho_i \rangle$, gdzie $\rho_i = S_i^z$ lub n_i ,) nie jest konsekwencją twierdzenia Mermin–Wagnera. Brak porządku magnetycznego/ładunkowego (wykładniczy zanik korelacji) jest możliwy przy $\langle \rho_i \rangle = 0$, t.j., przy braku fal gęstości. Z drugiej strony, sprzężenie z fononowymi stopniami swobody może prowadzić do powstania SDW czy CDW. Prosiłbym Autora o komentarz/sprostowanie.

(5) W Rozdziale VII Autor stwierdza, że nie-gaussowskie stany NGS prawidłowo opisują systemy skorelowane o skończonym rozmiarze. (strona 83: *“We find that the GS ansatz accurately describes the system in the thermodynamic limit, whereas the NGS ansatz effectively captures the finite-size behavior*). Czy to jest “tylko” obserwacja wynikająca z numerycznych wyników, czy też wniosek ten można zrozumieć na bazie struktury funkcji NGS?

Podsumowując, w mojej opinii, mgr. João Pedro Vieira de Mendonça Santosa wykonał szereg obliczeń które stanowią wkład do teorii układów silnie skorelowanych elektronów, w szczególności hybrydowych układów kwantowych. Przedłożona rozprawa spełnia wszystkie zwyczajowe oraz prawne wymagania określone w przepisach ustawy o stopniach i tytule naukowym do nadania stopnia doktora w dyscyplinie nauki fizyczne. Warto również zauważyć, że w dorobku publikacyjnym Pana Mendonça znajdują się jeszcze siedem innych artykułów, które nie zostały opisane w dysertacji. Na tej podstawie wnioskuję do Rady Naukowej Dyscypliny Nauki Fizyczne o dopuszczenie magistra João Pedro Vieira de Mendonça Santosa do publicznej obrony oraz dalszych etapów procedury w celu nadania mu stopnia naukowego doktora w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki fizyczne.

Jacek Herbrych
dr hab. Jacek Herbrych