



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

Warszawa, 12 maja 2025 r.

**Recenzja rozprawy doktorskiej pana mgra João Pedro Vieira de Mendonça Santosa
pt. „Studying strongly correlated hybrid quantum systems
through quantum simulations and efficient numerical approaches”**

Przedłożona do recenzji rozprawa doktorska pana mgra João Pedro Vieira de Mendonça Santosa została przygotowana pod kierunkiem dra hab. Krzysztofa Jachymskiego, prof. UW, na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego. Jest ona napisana w języku angielskim, jest podzielona na osiem rozdziałów, a załączony spis literatury zawiera 152 pozycje uszeregowane alfabetycznie. Zgodnie z wymaganiami ustawowymi, rozprawa zawiera też streszczenie napisane w języku angielskim oraz polskim. Merytoryczna część rozprawy oparta jest o dwuautorski (doktorant i promotor) oryginalny artykuł naukowy opublikowany w roku 2023 w Physical Review A, a także o trójautorski manuskrypt artykułu opublikowany w repozytorium arXiv. Obie te publikacje niewątpliwie zawierają wyniki oryginalne, a zgodnie z oświadczeniem autora rozprawy, miał on dominującą rolę w ich powstawaniu. Z tego punktu widzenia spełniony jest ustawowy warunek konieczności rozwiązania oryginalnego problemu badawczego przez kandydata do pierwszego stopnia naukowego.

W rozdziale 1. autor rozprawy wprowadza czytelnika w problematykę silnie skorelowanych układów kwantowych wielu ciał i zwraca uwagę na szczególne znaczenie fermionowo-bozonowych układów sprzężonych. Jako szczególny przypadek, z różnych powodów warty bardziej dogłębnej analizy, wskazuje na wielociałowe kwantowe układy hybrydowe, w których istotne znaczenie mają zarówno oddziaływania światło-atom jak i elektron-fonon. Są to zatem układy, które leżą dokładnie na przecięciu optyki kwantowej oraz materii skondensowanej. Idąc tym tropem, w tym wstępnym rozdziale mgr Mendonça Santos dokonuje przeglądu podstawowych modeli, które w przybliżeniu dotyczą tej problematyki, tj. modelu Dicke’a, modelu Heiseberga, modelu Fröhlicha, modelu Holsteina i jego rozszerzenia do modelu typu Hubbarda. Rozdział jest zakończony krótkim opisem typowych metod analitycznych i numerycznych służących badaniu takich modeli (bezpośrednia numeryczna diagonalizacja, QMC, DMRG).

Rozdział 2. to bardzo podręcznikowe wprowadzenie do elektrodynamiki kwantowej we wnęce rezonansowej. Rozpoczyna się od standardowego opisu kwantowania pola elektromagnetycznego i wprowadzenia fotonów jako wzbudzeń tego pola. W następnym fragmencie znajduje się szczegółowy opis własności stanów koherentnych wraz z dowodami podstawowych własności takich stanów. Następnie przechodzi do dyskusji oddziaływania atom-

pole w przybliżeniu dipolowym i opisuje własności atomu w przybliżeniu dwupoziomowym. Z niejasnych powodów opis tych własności (powszechnie znanych i dość oczywistych) jest szczególnie wyróżniony poprzez użycie ramki „Two-level systems recap”. W mojej ocenie opis wszystkich wymienionych do tej pory elementów jest zbyt długi i właściwie niepotrzebny, bo można je znaleźć w każdym podstawowym podręczniku akademickim. Ich szczegółowe powtarzanie w rozprawie doktorskiej jest zupełnie niepotrzebne. Ostatni fragment rozdziału 2. poświęcony jest tzw. przybliżeniu silnego oddziaływania, które pozwala zaniedbać dyssypację pola elektromagnetycznego z wnętrza i tym samym traktować układ materia-światło jako zamknięty i opisywany unitarnie. Ten najciekawszy fragment rozdziału opisujący dość nietrywialne zjawiska sprowadza się jednak do kilku ogólnikowych zdań i uwag kończących się stwierdzeniem, że będą one w dalszej analizie zaniedbywane.

W kolejnym rozdziale kandydat do stopnia naukowego prezentuje bardzo szczegółową analizę oddziaływania elektronów z wibracjami sieci. Rozpoczyna od drobiazgowego opisu klasycznego problemu małych drgań z jednym stopniem swobody. Następnie, przechodząc do problemu wielowymiarowego, pokazuje, że hamiltonian będący formą kwadratową położenia i pędów można zdiagonalizować. To pozwala mu wprowadzić pojęcie fononu jako wzbudzenia modów normalnych sieci. Powtarza się tutaj problem rozdziału poprzedniego — bardzo długie i zupełnie niepotrzebne powtarzanie standardowego opisu z typowego akademickiego podręcznika. Następnie, w bardzo krótkim fragmencie pobieżnie wyprowadza hamiltonian typu Hubbarda, gubiąc przy tym stałą Plancka we wzorze (3.33) oraz sumę po spinach we wzorze (3.37). Następny, znów niepotrzebnie rozbudowany fragment tego rozdziału poświęcony jest wyprowadzeniu hamiltonianu t - J i Heisenberga. Podrozdział 3.3 służy szczegółowemu wyprowadzeniu hamiltonianu Holsteina (3.66).

Rozdział 4. w pierwszych dwóch podrozdziałach sprowadza się ponownie do przywoływania szczegółowych informacji i wyprowadzeń z podręczników akademickich dotyczących stanów własnych hamiltonianów kwadratowych, grupy symplektycznej, parametryzacji przez kwadratury, stanów gaussowskich oraz stanów ściśniętych. W drugiej części rozdział ten zawiera natomiast dość istotny (i dobrze napisany) fragment poświęcony transformacjom hamiltonianu do postaci efektywnej, w której człony oddziaływania pomiędzy podukładami są kasowane na rzecz bardziej skomplikowanych (często nieliniowych) członów dla poszczególnych „ubranych” podukładów. Takie spojrzenie na układy oddziałujące jest szczególnie użyteczne w reżimie silnych oddziaływań, w których odrębność poszczególnych podukładów jest zatracona (np. polarony, ekscytony, etc.). W szczególności, jak jest to ładnie wykazane przez doktoranta w tym rozdziale, wykonując odpowiednią transformację dla hamiltonianu Holsteina lub Dicka można usunąć oddziaływania rząd po rzędzie.

Rozdział 5. zatytułowany „The hybrid method” w zamierzeniu ma wprowadzić czytelnika w nowatorską metodę numeryczną używaną w dalszej części do szczegółowej analizy silnie oddziałujących układów. Znaczna część tego rozdziału jest jednak pobieżnym przeglądem

typowych metod wariacyjnych: metody wariacyjnej Ritza, jej uogólnienia na problemy zależne od czasu (metoda Diraca–Frenkela oraz metoda McLachlana), metody czasu urojonego oraz metody opartej na renormalizacji zredukowanych macierzy gęstości. Metoda hybrydowa, która jest centralnym narzędziem stosowanym w kolejnych rozdziałach jest opisana dość zdawkowo i jest raczej przedstawieniem samej idei uzupełnionym listą odnośników do odpowiedniej literatury. Niestety trzeba stwierdzić, że ten rozdział nie spełnił swojego zadania, gdyż czytelnik, który z metodą hybrydową nigdy się nie spotkał po przeczytaniu tego rozdziału nadal nie będzie w pełni rozumiał jej przewagi nad innymi.

Pierwszym centralnym punktem rozprawy mgra Mendonça Santosa jest rozdział 6., w którym opisane są oryginalne wyniki naukowe opublikowane w czasopiśmie *Physical Review A*. Jest to rozdział napisany w zupełnie innym stylu niż poprzednie — jest bardzo skondensowany i hermetyczny, a w wielu miejscach jest po prostu bezpośrednią kopią fragmentów publikacji. W odróżnieniu od pierwszych czterech rozdziałów, akurat w tym rozdziale bardzo przydatne byłyby dłuższe i bardziej szczegółowe wywody wskazujące jak bardzo skomplikowany, a jednocześnie elastyczny i tym samym ciekawy z punktu widzenia doświadczalnego jest proponowany model. Czuję w tym miejscu wielki niedosyt poznawczy, bo czytając ten rozdział zupełnie nie odczułem, że dowiedziałem się z niego czegoś więcej niż było już opublikowane w artykule naukowym.

Zasadniczym celem rozdziału 6. jest wskazanie, że za pomocą omówionej w rozdziale 5. metody numerycznej możliwe jest dokładne zbadanie własności dość skomplikowanego i kilkupoziomowego modelu kwantowego układu wielociałowego. Modelowany układ może być dość uniwersalną platformą dla realistycznych symulacji kwantowych materii skondensowanej. Bazuje on na opisie typu Hubbarda dla elektronów, które poruszają się w sztucznej sieci formowanej przez atomy rydbergowskie. Atomy te oddziałują wzajemnie dalekozasięgowymi siłami dipolowymi i są utrzymywane w przestrzeni za pomocą optycznych tweezerów. W modelu dopuszczone są wibracje atomów względem ich położeń równowagi, co wprost prowadzi do uwzględnienia w modelu fononów. Elektrony zatem oddziałują w węzle sieci nie tylko między sobą (jak w typowym modelu Hubbarda), ale również z fononami. Warto w tym miejscu zaznaczyć, że w takim modelu oddziaływanie elektron-fonon silnie zależy od relacji dyspersyjnej wzbudzeń w sieci atomowej, która (przynajmniej teoretycznie) może być dość łatwo regulowana doświadczalnie poprzez odpowiedni dobór parametrów.

Drugi najważniejszy element rozprawy doktorskiej jest zawarty w rozdziale 7. i dotyczy on zastosowania metody hybrydowej do modeli typowych dla problemów elektrodynamiki kwantowej we wnętrzu. Tutaj badaniem obiektem jest łańcuch atomów (dwupoziomowych) umieszczonych we wnętrzu rezonansowej, której jeden z modów pola elektromagnetycznego jest dostrojony do przejścia atomowego. Dodatkowo dopuszczone jest oddziaływanie między atomami, które modelowane jest za pomocą hamiltonianu Heisenberga ze sprzężeniami pomiędzy najbliższymi sąsiadami. W przypadku takiego modelu, metoda hybrydowa poszukująca

stanu podstawowego całego hamiltonianu sprowadza się do naprzemiennego minimalizowania hamiltonianu opisującego pole elektromagnetyczne przy ustalonej konfiguracji spinów oraz hamiltonianu oddziaływania między spinami przy ustalonym stanie pola elektromagnetycznego. Zaprezentowane w tym rozdziale wyniki pokazują, że metoda hybrydowa rzeczywiście bardzo dobrze radzi sobie z takim zadaniem i pozwala dość szybko znaleźć przybliżony stan podstawowy całego układu dla całego spektrum parametrów modelu. Tym samym możliwe jest wyznaczenie różnych mierzalnych własności takiego układu takich jak średnia liczba fotonów, rozkład magnetyzacji (podłużnej i poprzecznej) w łańcuchu, korelacje przestrzenne pomiędzy wzbudzeniami atomów (spinami), itd. Rozdział ten jest napisany dość zgrabnie i przystępnie, choć wciąż w mojej ocenie trochę zbyt hermetycznie jak na fragment rozprawy doktorskiej prezentujący oryginalne wyniki.

Rozdział 8. to typowe, choć napisane dość obszernie, podsumowanie najważniejszych elementów opisanych w rozprawie.

Rozprawa mgra Mendonça Santosa jest napisana starannie, a wszystkie wywody w niej prowadzone są przejrzysto i zgodnie z metodą naukową. Uzyskane oryginalne wyniki będące podstawą rozprawy są bardzo ciekawe i mają niewątpliwie wartość naukową. Są także zaprezentowane w szerokim kontekście współczesnych badań co świadczy o bardzo dobrej orientacji doktoranta w tematyce, której dotyczy rozprawa. W moim odczuciu, jednym ze słabszych elementów rozprawy jest ewidentny brak zachowania równowagi pomiędzy bardzo obszernymi i czasami zbyt podręcznikowymi rozdziałami wstępnymi, a skondensowanymi i napisanymi bardzo hermetycznie fragmentami zawierającymi opis oryginalnych wyników. Szczególnie jest to odczuwalne, gdy czytelnik (trochę zmęczony całym beletrystycznym wstępem w pierwszych pięciu rozdziałach) przechodzi do rozdziału 6. i doświadcza całkowitej zmiany stylu na odpowiadający stylowi publikacji naukowej. Po lekturze całej rozprawy odnoszę wrażenie, że doktorant zbyt dużo pracy włożył w opisywanie i tłumaczenie elementów, które można znaleźć w bardzo wielu pozycjach (zarówno podręcznikach jak i wszelkiego rodzaju skryptach do wykładów), a zbyt mało w wyjaśnienie tych elementów, które są nowatorskie i specjalistyczne. Tym samym została w pewien sposób zatracona szansa na to, aby rozprawa stała się pozycją, do której będą często zaglądali różni naukowcy w celu zasięgnięcia informacji pogłębionej względem artykułów naukowych, na których opiera się rozprawa.

Podsumowując recenzję pozostaje mi stwierdzić, że rozprawa doktorska pana mgra João Pedro Vieira de Mendonça Santosa spełnia zarówno formalne jak i zwyczajowe warunki stawiane kandydatom do stopnia naukowego doktora w zakresie fizyki. Wnioskuje zatem o dopuszczenie kandydata do kolejnych etapów postępowania prowadzonego na Uniwersytecie Warszawskim w celu uzyskania przez niego stopnia naukowego doktora w zakresie nauk ścisłych i przyrodniczych w zakresie fizyki.