UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI W KRAKOWIE

INSTYTUT FIZYKI IM. MARIANA SMOLUCHOWSKIEGO
Zakład Teorii Materii Materii Skondensowanej i Nanofizyki
dr hab. Adam Rycerz
E-mail: rycerz@th.uj.edu.pl
WWW: http://th.if.uj.edu.pl/~adamr/

Kraków, 24 maja 2016

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Dawida Crivellego pt. "Particle and energy transport in strongly driven one-dimensional quantum systems"

Praca doktorska została wykonana w Zakładzie Fizyki Teoretycznej Instytutu Fizyki Uniwersytetu Śląskiego, promotorem był prof. dr hab. Marcin Mierzejewski, a promotorem pomocniczym dr Andrzej Ptok. Przedmiotem badań teoretycznych opisanych w pracy była ewolucja czasowa jednowymiarowych układów oddziałujących cząstek (tzw. bezspinowych fermionów) w obecności zmiennych pól elektromagnetycznych. Praca napisana jest w języku angielskim, liczy 140 stron, i ma tradycyjną formę jednolitego tekstu podzielonego na 8 rozdziałów uzupełnionych listą publikacji Autora i spisem cytowanej literatury. Pierwsze cztery rozdziały (*Introduction*, *Numerical methods for quantum thermal dynamics*, *Pure states thermodynamics*, oraz *Motivation*) mają charakter wprowadzający, szereg zagadnień zilustrowano jednak oryginalnymi przykładami numerycznymi doktoranta. W szczególności, wyniki przedstawione w podrozdziale 1.2. (*Integrability and Random Matrix Theory*) dotyczące rozkładu statystycznego odstępów pomiędzy poziomami energetycznymi pozwalają, dość nieoczekiwane, rozszerzyć listę układów wykazujących cechy chaosu kwantowego na przypadek jednowymiarowy z silnymi korelacjami elektronowymi. Pozostałe trzy rozdziały zawierają omówienia wyników otrzymanych przez doktoranta i przedstawionych w czterech artykułach naukowych (jedna praca w *Physical Review Letters*, dwie w *Physical Review B*, jeden rozdział w książce wyd. Springer Netherlands; doktorant jest także współautorem 4 innych artykułów w czasopismach naukowych niepowiązanych tematycznie z doktoratem). Rozdział 8. zawiera syntetyczne podsumowanie wyników przedstawionych w rozdziałach 5-7. Rozprawa opatrzona jest także streszczeniami w języku angielskim i polskim.

Doktorant zajmował się zagadnieniem termalizacji układu kwantowego tj. określeniem warunków, po spełnieniu których dostatecznie złożony układ kwantowy —

pozostający podczas ewolucji czasowej w stanie czystym — można podzielić na części A i B, z których mniejsza (tzw. podukład) A po upływie dostatecznie długiego czasu zachowuje się w sposób nierozróżnialny od układu pozostającego w równowadze termodynamicznej z otoczeniem (B) — a zatem w stanie mieszanym. Szczegółowa analiza stanu podukładu, charakteryzowanego ilościowo w ramach formalizmu macierzy gęstości, pozwoliła (w pewnych przypadkach) na zdefiniowanie temperatury efektywnej oraz dyskusję własności spektralnych macierzy gęstości. Z kolei analiza procesów wymiany materii (a zatem ładunku elektrycznego) i energii pomiędzy częściami A i B umożliwiła dyskusję przewodnictwa elektrycznego i zjawisk termoelektrycznych w układzie z silnymi korelacjami elektronowymi, w szczególności poza obszarem liniowej odpowiedzi, gdzie mogą pojawiać się oscylacje Blocha.

Jednowymiarowy układ bezspinowych fermionów został wybrany nieprzypadkowo. Taki układ modelowy z jednej strony pozostawia znaczną swobodę manipulacji charakterem stanów kwantowych: w zależności od wyboru parametrów modelu, hamiltonian układu może być całkowalny lub nie, zaś np. stan podstawowy może mieć charakter metaliczny lub charakter izolatora typu Motta–Hubbarda. Co więcej, zastosowanie warunków brzegowych Borna–von Karmana (tzw. periodycznych warunków brzegowych) w połączeniu z zależnym od czasu tzw. fikcyjnym strumieniem magnetycznym przechodzącym przez układ pozwala w elegancki sposób wprowadzić efektywne pole elektryczne, które generuje przepływ materii i energii bez naruszania symetrii translacyjnej. Z drugiej strony, wymiar przestrzenu Hilberta (p.H.) dla takiego układu jest stosunkowo niski (równy wymiarowi p.H. dla łańcucha Heisenberga, tj. 2^L gdzie L jest liczbą węzłów w łańcuchu) co umożliwiło analizę numeryczną stanów kwantowych i ich dynamiki za pomocą metod, które mają charakter nieperturbacyjny i nie generują błędów systematycznych, a zatem ich stosowalność nie jest z góry ograniczona do obszaru liniowej odpowiedzi. Doktorant stosował różne warianty algorytmu Lanczosa, co wydaje się optymalnym wyborem głównie z uwagi na różnorodność rozważanych zjawisk i sytuacji fizycznych.

Omówię teraz krótko wyniki przedstawione w rozdziałach 5-7 rozprawy.

Rozdział 5. (*Transport in strongly driven homogeneous quantum systems*) poświęcony jest modelowaniu odpowiedzi układu, tj. natężenia prądu elektrycznego i prądu energii cieplnej, po gwałtownym włączeniu pola elektrycznego (tzw. *quench*). Podstawowym narzędziem badawczym była tutaj zaproponowana przez doktoranta i opisana w podrozdziale 2.4 (*Numerical Equilibrium Linear Response*) metoda rozwinięcia funkcji Greena w przestrzeni Kryłowa wraz z zastosowaniem do obliczeń przewodnictwa w temperaturach skończonych (T>0). Przeprowadzone symulacje pozwoliły wyraźnie rozdzielić obszary liniowej odpowiedzi, w którym natężenia rozważanych prądów są wprost proporcjonalne do natężenia pola elektrycznego F, oraz

obszar (granicę) termalizacji, której prądy są w przybliżeniu proporcjonalne do tzw. efektywnej temperatury odwrotnej. Dla dużych wartości F zaobserwowano oscylacje Blocha, które ujawniają się m.in. poprzez kwaziperiodyczny charakter zależności prądu od F. Oscylacje takie są szczególnie wyraźne w przypadku gdy parametry hamiltonianu są tak dobrane, aby układ — pod nieobecność pola zewnętrznego — był całkowalnym izolatorem Motta. Sporo miejsca poświęcono również dyskusji stosunku natężeń prądów elektrycznego i cieplnego R(t), który w obszarze liniowej odpowiedzi jest stały, tzn. nie zależy od czasu (t) ani od wartości F. Poza obszarem liniowej odpowiedzi zachowanie R(t) może dostarczyć ciekawych informacji o układzie. Dla przykładu, całkowalny izolator Motta charakteryzuje się stałym R(t) także w sytuacji, gdy prądy w liczniku i mianowniku tej wielkości wykazują oscylacje Blocha. Z kolei w obszarze metalicznym, silne pole F może prowadzić do wzrostu R(t) znacznie powyżej wartości przewidzianej dla obszaru liniowej odpowiedzi. Ważną charakterystyką zachowania R(t) w granicy $t \to \infty$ jest tzw. nierówność Mazura, która jest konsekwencją spostrzeżenia, że wartość oczekiwana prądu w układzie balistycznym daje się wyrazić poprzez rzutowania na całki ruchu. Autor rozprawy szczegółowo analizuje, w jakich warunkach nierówność Mazura ma bezpośrednie zastosowanie dla rozważanych układów a w jakich nie. W szczególności, dla układów całkowalnych pod działaniem stałego F wartości R(t) są bardzo bliskie dolnej granicy zadanej nierównością Mazura.

Rozdział 6. (*Reduced dynamics and entropy density in strongly driven systems*) rozpoczyna wnikliwa dyskusja, w jakich warunkach odwracalna ewolucja czasowa układu kwantowego, opisana zależnym od czasu równaniem Schrödingera, może prowadzić do lokalnych zachowań wielkości termodynamicznych (definiowanych w oparciu o zredukowane macierze gęstości) nierozróżnialnych od zachowań charakteryzujących procesy nieodwracalne, np. wzrostu lokalnej entropii. W dalszej części rozdziału wprowadzono koncepcję termalizacji układu i opisano procedurę obliczania zależnej od czasu efektywnej temperatury odwrotnej $\beta_{eff}(t)$, która stanowi syntetyczną charakterystyką rozkładu wartości własnych zredukowanej macierzy gęstości. Następnie, dyskutowano własności statystyczne logarytmu zredukowanej macierzy gęstości w zestawieniu z gaussowskimi zespołami macierzy przypadkowych (*gaussian orthogonal ensemble* — GOE, *gaussian unitary ensemble* — GUE). Pokazano, że statystyka GOE pojawia się pod nieobecność pola F nawet w przypadku, gdy układ jest całkowalny (a zatem rozkład wartości władnych hamiltonianu jest poissonowski), ponieważ całki ruchu układu jako całości (A+B) na ogół nie są adekwatne dla opisu podukładu A. Podobnie, dla F>0 zredukowana macierz gęstości wykazuje statystykę typu GUE, ponieważ obecność fazy Peierlsa łamie lokalną symetrię odwrócenia czasu dla podukładu. Te obserwacje niewątpliwie stanowią ciekawe uzupełnienie dyskusji powszechności przejawów chaosu kwantowego

w różnych układach kwantowomechanicznych i ich klasycznych analogach. Warto nadmienić, że opisane wyniki są podstawą artykułu [M. Mierzejewski i in., *Phys. Rev. Lett.* **110**, 200602 (2013)] którego doktorant jest współautorem, a który spotkał się ze sporym zainteresowaniem różnych środowisk naukowych (artykuł był cytowany 10 razy, m.in. w czasopismach *Phys. Rev. A*, *Phys. Rev. B* i *Phys. Rev. E*).

W rozdziale 7. (*Thermoelectrical phenomena beyond linear response*) przedstawiono analizę teoretyczną w pełni kwantowego modelu termozłącza, w ramach którego możliwa jest w szczególności dyskusja procesów nierównowagowych (także oscylacji Blocha). Rozważany w poprzednich rozdziałach jednowymiarowy układ bezspinowych fermionów został zmodyfikowany poprzez wprowadzenie nierównoważności węzłów. Dokładniej, jedna połowa układu (L/2 węzłów) ma inną energię atomową niż druga połowa, dobrane w taki sposób, aby hamiltonian pozostał niezmienniczy względem jednoczesnego odbicia przestrzennego i transformacji cząstka–dziura. Taki zabieg odpowiada minimalnej, z punktu widzenia globalnych symetrii, modyfikacji modelu niezbędnej do opisu zjawisk termoelektrycznych. Ponownie, przedyskutowano szczegółowo zagadnienie termalizacji układu i sposób obliczania $\beta_{eff}(t)$, która po opisanej modyfikacji może być zależna od położenia (numeru węzła) w pierścieniu. Rozdział zawiera kompletną dyskusję szeregu zjawisk termoelektrycznych, które mogą zachodzić w rozważanym układzie, ze szczególnym uwzględnieniem roli procesów nierównowagowych, jak również wpływu cech fundamentalnych modelu (całkowalność lub jej brak) na intensywność i charakter zjawisk termoelektrycznych. Centralnym wynikiem jest tutaj tzw. dynamiczne odwrócenie efektu Peltiera. Okazuje się, że dla fazy izolatora Motta, po odpowiednio długim czasie kierunek przepływu ciepła wzbudzonego polem elektrycznym może ulec odwróceniu, natomiast dla fazy metalicznej podobne zjawisko nie zachodzi.

Rozprawa została przygotowana z dużą starannością, a wykazany w uzupełnieniu A dorobek naukowy doktoranta (łącznie 8 publikacji, w tym 7 w czasopismach recenzowanych) zasługuje na uznanie. Doktorant nie ustrzegł się jednak drobnych nieścisłości terminologicznych i błędów edytorskich, z których kilka przykładowych wskazuję poniżej.

- W rozdziale 1. kilkakrotnie użyto określenia *high-temperature state* w odniesieniu do wysokowzbudzonego stanu własnego hamiltonianu (niezależnego od czasu) opisującego układ izolowany.

- W kilku miejscach początkowej części pracy pojawiają się bezpośrednie odwołania wprzód do konkretnych rysynków, podrozdziałów itp.

- We wzorze (1.34) nie zdefiniowano symbolu D^N.

- Wzór (1.44) jest błędny: zamiast E_i prawdopodobnie powinno być $1/(E_{i+1}-E_i)$.

- W pierwszym akapicie rozdziału 2. napisano: "operatory w mechanice kwantowej są z definicji hermitowskie", co jest prawdą jedynie w kontekście operatorów odpowiadających wielkościom mierzalnym.

- Opis rysunku 2.1 prawdopodobnie jest błędny: w tekście mowa o liczbie $9*10^8$ stanów kwantowych; pełna baza przestrzeni Hilberta (bez podziału na podprzestrzenie) układu zawierającego L=10 węzłów liczy 2^{10}=1024 stany.

- W podpisie rysunku 2.2 rząd jednego z wielomianów (7.) jest inny niż podano na samym rysunku (8.)

Powyższe niedociągnięcia zostały rzecz jasna wskazane wyłącznie z poczucia obowiązku recenzenta i najmniejszym stopniu nie wpływają na moją ocenę wartości naukowej pracy; wskazać należy że ogólna liczba błędów językowych i redaktorskich jest znikomo mała jak na pracę liczącą 140 stron. Obok zalet czysto naukowych praca z całą pewnością będzie użytecznym źródłem informacji dla osób zainteresowanych tematyką układów niskowymiarowych z silnymi korelacjami elektronowymi, głównie z uwagi na unikalne połączenie kompletnego wykładu technik obliczeniowych z ciekawymi przykładami ilustrującymi fizykę zjawisk zachodzących w rozważanych układach. Szczególnie wartościowe z tego punktu widzenia wydają się rozdziały 2. (*Numerical methods for quantum thermal dynamics*) i 3. (*Pure states thermodynamics*), w których przedstawiono zwięzły — a zarazem całościowy — opis algorytmu Lanczosa i jego adaptacji do opisu ewolucji czasowej, zespołu kanonicznego i zagadnień pokrewnych. Na podkreślenie zasługuje także zajmujący sposób, w jaki doktorant wyłożył podstawy teoretyczne działania algorytmu Lanczosa dla temperatur skończonych, oraz szczegółowo przedyskutował warunki, po spełnieniu których średniowanie po stanie czystym (odpowiednio przygotowanym) może dawać wyniki tożsame z oczekiwanymi dla średniowania po zespole kanonicznym w T>0. Te cechy pracy jednoznacznie wskazują zarówno na doskonałe opanowanie przez doktoranta technik obliczeniowych wykorzystywanych w opisanych badaniach, jak również na głębokie zrozumienie podstaw fizycznych dyskutowanych zjawisk.

W końcowej części recenzji wskażę drobne wątpliwości, które nasunęły mi się podczas lektury doktoratu, a które — mam nadzieję — zostaną w pełni wyjaśnione w czasie publicznej obrony:

1. Jak wspomniano, wyniki przedstawione na rys. 1.4 i 1.5 stanowią znakomitą ilustrację stosowalności teorii macierzy przypadkowych i pojęć z zakresu chaosu kwantowego do opisu układów rzadko rozważanych w tym kontekście. Szkoda, że analiza nie jest tutaj równie głęboka jak w innych przypadkach rozważanych

w dalszych częściach pracy. W szczególności, wybrany przykład (L=20, N=12) dotyczy sytuacji, gdy układ nie wykazuje przejścia metal-izolator. Czy takie przejście (możliwe dla wypełnienia połówkowego N=L/2) ma swoje odzwierciedlenie w statystykach spektralnych?

2. W rozdziale 6., dyskutując stosowalność rozwinięcia wysokotemperaturowego (por. Fig. 6.3) wskazano, że rozwinięcie to można stosowań dla temperatur odwrotnych $\beta<0.4$. Jak taka wartość — podana w jednostkach bezwymiarowych — przekłada się na temperatury w jednostkach fizycznych?

3. W rozdziałach 6. i 7. sporo miejsca poświęcono wprowadzeniu pojęcia efektywnej temperatury odwrotnej. Jakie dokładnie przesłanki wskazują, że postać hamiltonianu efektywnego H_{eff} nie zależy od czasu?

W podsumowaniu, nie mam najmniejszych wątpliwości, że przedstawiona mi do oceny praca z nawiązką spełnia wszelkie ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim i wnioskuję o dopuszczenie doktoranta do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Adam Rycerz