

prof. dr hab. Andrzej Drzewiński
Instytut Fizyki
Uniwersytet Zielonogórski

Zielona Góra, 5 stycznia 2024 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Agaty Krzywickiej zatytułowanej
„Pair condensation in the Bose-Hubbard Model: a path integral analysis”

Niniejszą recenzję przygotowałem na prośbę Rady Naukowej Dyscyplin Nauki Fizyczne i Astronomia Wydziału Fizyki UAM. Mgr Agata Krzywicka swoją rozprawę doktorską wykonała pod kierunkiem dra hab. inż. Tomasza Polaka, prof. UAM. Rozprawa dotyczy kwantowych układów silnie oddziałujących cząstek podlegających statystyce Bosego-Einsteina analizowanych w oparciu o formalizm modelu Bosego-Hubbarda.

Model Bosego-Hubbarda jest przybliżeniem wyjściowego hamiltonianu wielociałowego w formalizmie drugiej kwantyzacji, który opisuje gaz oddziałujących bozonów w periodycznym potencjale zewnętrznym. Aby zachować istotę silnego oddziaływania międzycząsteczkowego, a zarazem uprościć zagadnienie, wyjściowy hamiltonian zostaje zazwyczaj ograniczony do dwóch wyrazów: oddziaływania na węzle oraz tunelowania pojedynczej cząstki pomiędzy dwoma najbliższymi węzłami. Jednak, aby zbadać własności termodynamiczne tego układu, nadal niezbędne jest zastosowanie dalszych przybliżeń. Naturalnie można zakwestionować pierwotną redukcję i pozostawić więcej – standardowo odrzucanych – oddziaływań z wyjściowego modelu. Jednak to znacznie zwiększa złożoność modelu, a tym samym pociąga za sobą konieczność użycia kolejnych przybliżeń. Moim zdaniem nadrzędnym celem doktorantki była próba – i to całkiem udana – odsłonięcia złożonych relacji pomiędzy wyjściowym modelem a stosowanym formalizmem dająca nadzieję na zoptymalizowanie tego wyboru. Cel ten był realizowany w oparciu o cele szczegółowe: wykazanie obecności skorelowanych par bozonów, analizę charakteru przejścia fazowego do kondensatu par, a także wpływu kondensatu par na zachowanie kondensatu pojedynczych cząstek (BEC). Dodatkowo doktorantka pokazała, że standardowy model Bosego-Hubbarda – jeśli zostaną uwzględnione korelacje w czasie Matsubary – również prowadzi do oddziaływań indukowanych gęstością. Generalnie, wyniki stanowiące treść niniejszej dysertacji stanowią oryginalny wkład naukowy do fizyki materii skondensowanej, w tym do analizy zachowania ultrazimnych gazów ulokowanych w sieciach optycznych.

Rozprawa mgr Agaty Krzywickiej – przygotowana w języku angielskim – liczy 164 strony, składa się z abstraktu, pięciu rozdziałów, czterech rozbudowanych dodatków, zestawienia publikacji doktorantki oraz spisu literatury. Całość uzupełnia informacja o dorobku przedstawianym w postępowaniu, opinia promotora oraz oświadczenia promotora i doktorantki o ich merytorycznym wkładzie w powstanie publikacji.

W **rozdziale 1** zapoznajemy się – w kontekście eksperymentów przeprowadzanych dla

układów neutralnych atomów spułapkowanych w sieciach optycznych – z pytaniami stawianymi przez doktorantkę oraz z modelem teoretycznym stanowiącym podstawę dla jej teoretycznych rozważań. Towarzyszy temu, podana w zwartej postaci, prezentacja metod – zarówno numerycznych, jak i analitycznych – służących analizie modelu teoretycznego. Poziom złożoności analizowanych zagadnień sprawia, że przybliżenia są nieodzowne, ale niektóre mogą gubić istotne aspekty badanych układów fizycznych. Dlatego warto dodać, że stosowane przez autorkę metody w większości przypadków zachowują korelacje wielociałowe, co pozwala uchwycić zjawiska, które wymykają się podejściu opartemu wyłącznie na koncepcji pola średniego.

W **rozdziale 2** autorka wprowadza i uzasadnia rozszerzenie standardowego modelu Bosego-Hubbarda o wyraz opisujący tunelowanie indukowane gęstością. Jego uwzględnienie pozwala wykazać obecność kondensatu dla par cząstek, którego wpływ na zachowanie kondensatu BEC jest analizowany.

W **rozdziale 3** bazując na podobieństwie wyrazów odpowiedzialnych za proces parowania w drugim rzędzie rozwinięcia modelu efektywnej fazy z wyrazem odpowiadającym za dyssypację w modelu Caldeira–Leggetta dedykowanemu analizie dynamiki układu kwantowego sprzęgniętego z otoczeniem, doktorantka przestudiowała zachowanie dwóch sprzęgniętych ze sobą kondensatów, dla par i pojedynczych cząstek. Co ciekawe, pokazała, że oddziaływania wielociałowe mogą same z siebie także prowadzić do zachowania dyssypacyjnego, a separacja podukładów nie jest niezbędna.

W **rozdziale 4** autorka weryfikuje przyjętą hipotezę, że parowanie cząstek poddanych statystyce Bosego-Einsteina można także otrzymać w oparciu o standardowy model Bosego-Hubbarda. Kluczowe okazało się rozwinięcie funkcji korelacyjnej faza-faza do drugiego rzędu, które prowadzi do pojawienia się odpowiedniego wyrazu zależnego od czasu Matsubary. Aby przeanalizować wpływ kondensatu par otrzymanego dzięki korelacjom, autorka wykorzystała podejście oparte o Samouzgodnione Przybliżenie Harmoniczne (SCHA).

Rozdział 5 zawiera porównanie obydwu mechanizmów prowadzących do utworzenia kondensatu dla par cząstek bozonowych. Co więcej, autorka pokazała, jak można zastosować orbitalne efekty magnetyczne, aby ułatwić rozróżnienie między dwoma mechanizmami parowania

Dodatki A, B, C zawierają szczegółowe obliczenia uzupełniające opis modeli oraz przybliżeń wykorzystanych we wcześniejszych rozdziałach.

Dodatki D, E zawierają odpowiednio analityczne formuły dla funkcji gęstości stanów dla różnych pól magnetycznych oraz zestawienie publikacji autorki.

Trzy publikacje, które ukazały się podczas przygotowania niniejszej rozprawy doktorskiej zostały opublikowane w czasopismach naukowych o międzynarodowym zasięgu, które są wykazane na liście czasopism MEiN wraz z przypisaną im punktacją: (1) Annals of Physics; IF=3 i 100 pkt. MEiN; (2) Journal of Magnetism and Magnetic Materials; IF=2,993 i 100 pkt. MEiN; (3)

Acta Physica Polonica; IF=0.725 i 70 pkt. MEiN. We wszystkich pracach współautorem jest Tomasz Polak – promotor pracy doktorskiej, zaś do rozprawy dołączono oświadczenia określające jego wkład.

Rozważając rozszerzenie standardowego modelu Bosego-Hubbarda niejednokrotnie podnoszono kwestię uwzględnienia wpływu położenia innej cząstki na amplitudę tunelowania danej cząstki. W szczególności duże zainteresowanie wzbudzało uwzględnienie tunelowania indukowanego gęstością, czasem zamiennie nazywane "bond-charge interactions", którego można oczekiwać ze względu na skończony zasięg funkcji Wanniera poza pojedynczy węzeł sieci. Spodziewano się eksperymentalnego potwierdzenia w sieciach optycznym, gdzie parametry układu mogą być dobrze kontrolowane, co istotnie miało miejsce w 2014 (Ole Jürgensen i inni). Doktorantka, aby uzyskać pełniejszy obraz, niż mogłaby dać teoria pola średniego, zastosowała do analizy tego przypadku formalizm całek po trajektoriach pozwalający transformować układ z reprezentacji położeniowej do reprezentacji sprzężonych z nimi faz oraz model kwantowego rotatora. To podejście pozwoliło na sformułowanie efektywnego działania zależnego tylko od fazy, a następnie przeniesienie go na model pseudospinowy $S = 1$ i otrzymanie równań dla linii krytycznych. Dzięki temu doktorantka mogła wykazać istnienie sygnatur dla niepotwierdzonej wcześniej fazy nadciekłej opartej o kondensat par obecny w skończonych temperaturach, niezależnie od obecności kondensatu BEC. Analizując wpływ tunelowania indukowanego gęstością na kondensat BEC doktorantka pokazała, że uwzględnienie w hamiltonianie wyrazu opisującego ten proces prowadzi do efektywnego standardowego hamiltonianu Bosego-Hubbarda, ale ze zmodyfikowanymi współczynnikami zawierającymi amplitudę T tunelowania indukowanego gęstością. Generalnie mamy do czynienia z dwoma współzawodniczącymi efektami: redukcją kondensacji BEC z amplitudą $2T$, niezależnie od temperatury i gęstości oraz wzmocnienia fazy nadciekłej w obszarach o dużych gęstościach i niskich temperaturach. Dzięki wyznaczeniu zależności ciepła właściwego od temperatury można było pokazać, że przejścia fazowe dla obydwu kondensatów zachodzą tam, gdzie fluktuacje energii są największe. Co więcej, wykresy przedstawiające zależność ciepła właściwego od temperatury zredukowanej dowodzą, że w obydwu przypadkach w pobliżu przejścia fazowego mamy zachowanie typu lambda.

Tunelowanie indukowane gęstością wpływa na bozony w sieci optycznej na różne sposoby, w zależności od siły oddziaływania. W zakresie parametrów, gdzie $t/T < 1$, kondensacja BEC jest silnie stłumiona, a fluktuacje energii są duże, chociaż ograniczone do wąskiego zakresu temperatur. Z kolei dla zakresu parametrów $t/T > 1$ można zaobserwować silną fazę nadciekłą BEC oraz dobrze ustaloną i oddzieloną fazę kondensatu par. Dla dużych wartości amplitudy tunelowania indukowanego gęstością temperatura krytyczna kondensacji BEC jest znacząco wyższa, a ciepło właściwe wykazuje drugi ostry pik (zachowanie typu lambda). Dla amplitud T mniejszych niż

standardowa amplituda tunelowania t pik (typu λ) dla BEC w cieple właściwym staje się szerszy. Zaprezentowane wykresy zależności parametru porządku (dla obydwu kondensatów) od zredukowanej temperatury uzyskane w formalizmie modelu efektywnej fazy dowodzą, że temperatura krytyczna dla kondensatu par jest zawsze powyżej temperatury krytycznej dla kondensatu BEC.

Ważnym wynikiem niniejszej dysertacji jest wykazanie, że efekty wywołane tunelowaniem indukowanym gęstością można otrzymać dla standardowego modelu Bosego-Hubbarda, jeśli stosowane przybliżenie będzie zachowywało korelacje w czasie Matsubary. Powszechnie podczas całkowania po polach bozonowych stosowane jest przybliżenie pierwszego rzędu, jednak – co pokazała doktorantka – kluczowe jest uwzględnienie wkładu od drugiego rzędu. Podobnie jak w przypadku pojawienia się kondensatu par za sprawą obecności wyrazu w Hamiltonianie odpowiedzialnego za tunelowanie indukowane gęstością, temperatura krytyczna BEC przesuwa się w stronę wyższych temperatur. Jednak, co należy podkreślić, w tym przypadku temperatura krytyczna dla kondensatu BEC, jak i dla kondensatu par okazuje się identyczna.

Proszę, aby podczas obrony doktorantka przeprowadziła dyskusję przyczyn tej różnicy dla obydwu diagramów oraz ewentualnych konsekwencji płynących dla potencjalnych eksperymentów.

W niniejszej dysertacji doktorantka poświęciła dużą uwagę zachowaniom dyssypacyjnym, które pojawiają się w modelu silnie skorelowanych bozonów z dodatkowymi oddziaływaniami. Powszechną praktykę stanowi sprzęgnięcie układu z otoczeniem, zazwyczaj rozumianym jako układ oscylatorów harmonicznym o ciągłym rozkładzie częstotliwości rezonansowych. Doktorantka zastosowała takie podejście wprowadzając do hamiltonianu sprzężenie harmoniczne pomiędzy dwoma kondensatami. Pokazała, że otrzymujemy wtedy jakościowo poprawny opis zachowania układu, ale oprócz obszaru krytycznego, mimo częściowo uwzględnienia fluktuacji kwantowych. Na linii krytycznej oddzielającej fazę nadciekłą BEC od fazy izolatora Motta, kiedy uwzględniany jest efekt tunelowania indukowanego gęstością, mamy do czynienia z regulowanym gęstością przejściem od fazy nadciekłej do fazy izolatora Motta i z powrotem.

Alternatywne podejście doktorantki opierało się na pozostawieniu funkcji korelacyjnej faza-faza w pełnej postaci, razem z wyrazem zależnym od czasu Matsubary. Ponieważ działanie wyprowadzone z czasem Matsubary zawiera pełną informację o fluktuacjach kwantowych, dyssypacyjny charakter zachowania kondensatu par pojawił się tutaj w naturalny sposób. Nie ma potrzeby, jak w poprzednim podejściu traktować układ jako dwa sprzężone ze sobą kondensaty. Okazało się, że alternatywny sposób zagwarantował prawidłowy opis zachowania układu, w tym dla fazy nadciekłej BEC, gdzie na linii krytycznej pojawia się dekoherencja w pewnym zakresie gęstości.

Równocześnie, mając na uwadze, że zachowanie dyssypacyjne może generować efektywne

oddziaływania pomiędzy cząstkami, doktorantka pokazała, że może mieć miejsce odwrotna sytuacja, gdy oddziaływania wielociałowe – same w sobie – mogą być źródłem zachowań dyssypacyjnych. Przeprowadzone przez doktorantkę analizy pokazują jak w eksperymentach z silnie oddziałującymi atomami Bosego wewnętrznie korelacje wpływają na kondensat. Tym samym dekoherencja nie zawsze wynika ze sprzężenia z zewnętrznymi stopniami swobody, gdyż układ może sam dla siebie pełnić rolę takiego rozpraszającego środowiska. Wartościowa jest także sama analiza różnic i podobieństw w zachowaniu obydwu kondensatów par wykreowanych odpowiednio dzięki oddziaływaniom, bądź dzięki korelacjom. To porównanie zostało przeprowadzone w ramach takich samych przybliżeń. Całość rozważań bez wątpienia stanowi kolejny wartościowy wynik niniejszej dysertacji.

Doktorantka słusznie zauważa, że wyniki przedstawione w pracy wymagają potwierdzenia eksperymentalnego. Zasadniczo w eksperymentach wykonywanych na sieciach optycznych mamy kontrolę nad wieloma parametrami układu, m.in. nad wymiarem i kształtem siatki, energią kinetyczną atomów, a nawet siłą oddziaływania pomiędzy atomami. Mając na uwadze zagadnienia badane przez doktorantkę, w pierwszej kolejności powinna istnieć możliwość zmierzenia efektu wpływu obecności kondensatu par na temperaturę krytyczną BEC.

Poproszę, aby podczas obrony doktorantka rozwinęła wątek aplikacyjności wyników swoich analiz teoretycznych.

Głównym celem fizyki materii skondensowanej jest zrozumienie właściwości różnych stanów materii. Często zachowanie makroskopowego układu wielu cząstek staramy się opisać w oparciu o model mikroskopowy. W niektórych przypadkach takie kolektywne zachowanie można analizować jako sumę niezależnych wkładów od pojedynczych cząstek, bądź quasi-cząstek, lecz badany przez doktorantkę układ silnie oddziałujących cząstek do takich nie należy. Fakt ten nakłada duże wymagania na stosowany aparat metodologiczny. Moim zdaniem doktorantka, w pełni świadoma stanu rzeczy, bardzo dobrze się z tego wywiązała. Jej dysertacja daje znaczący przyczynek do dyskusji towarzyszącej badaniu kwantowych układów wielu cząstek, a dotyczącej poprawności stosowanych przybliżeń.

Podsumowując przedstawiona do oceny rozprawa doktorska stanowi oryginalne rozwiązanie problemu badawczego stanowiąc potwierdzenie tego, że autor potrafi samodzielnie prowadzić prace naukowe. W tym miejscu zasadne będzie wspomnieć, że mgr Agata Krzywicka jest współautorem dwóch innych artykułów naukowych podanych w Dodatku D, a jeszcze nie opublikowanych.

Reasumując, stwierdzam, że rozprawa spełnia warunki zgodne z art. 13 ust. 1 Ustawy z dnia 14 marca 2003 roku o stopniach i tytułach naukowych oraz o stopniach i tytułach w zakresie sztuki (tj. Dz.U. z 2017 r. poz.1789) i wnoszę o dopuszczenie mgr Agaty Krzywickiej do dalszych etapów postępowania.

Grzegorz Drużdż