

Wrocław, 8.01.2024

Prof. dr hab. Marcin Mierzejewski  
Instytut Fizyki Teoretycznej  
Wydział Podstawowych Problemów Techniki  
Politechnika Wrocławska  
Wybrzeże Wyspiańskiego 27  
50-370 Wrocław

**Recenzja rozprawy doktorskiej Pani Agaty Krzywickiej pt.  
“Pair condensation in the Bose-Hubbard model: a path integral analysis”**

Rozprawa doktorska Pani Agaty Krzywickiej została przygotowana pod opieką dr. hab. Tomasza Polaka, profesora UAM. Zawiera ona teoretyczną analizę ciekawego i bardzo oryginalnego zagadnienia, które zostało precyzyjnie sformułowane już w pierwszym akapicie rozprawy. Autorka bada układy oddziałujących bozonów, w których istnieją korelacje parujące lub oddziaływania prowadzące do tworzenia się par bozonów. Pary bozonów mogą podlegać kondensacji Bosego-Einsteina podobnie jak ma to miejsce w przypadku niesparowanych cząstek. W efekcie możemy mieć do czynienia z sytuacją, gdy kondensat par współlistnieje z kondensatem niesparowanych cząstek. Przedmiotem rozprawy jest matematyczny opis takiej sytuacji w ramach formalizmu całek po trajektoriach. Autorka uzyskała ciekawe wyniki ilościowe w drodze obliczeń analitycznych przy minimalnym wykorzystaniu obliczeń numerycznych, co jest bardzo cennym, lecz coraz rzadziej spotykanym podejściem w badaniach układów silnie oddziałujących cząstek kwantowych.

Rozprawa napisana jest w języku angielskim, zawiera pięć rozdziałów oraz cztery dodatki. Ponieważ formalizm stosowany w rozprawie jest dość złożony, Autorka podjęła próbę oddzielenia najważniejszych wyników fizycznych, które są omówione w głównej części rozprawy, od formalnych obliczeń analitycznych, które zostały przedstawione w dodatkach. Z całą pewnością oddzielenie formalizmu od wyników było sporym wyzwaniem, lecz nie jestem do końca przekonany, że był to najlepszy wybór. Główna część rozprawy zawiera stosunkowo dużo wzorów, których pochodzenie trudno jest zrozumieć bez prześledzenia obliczeń prezentowanych w dodatkach. Moim zdaniem znacznie łatwiejsze jest czytanie dodatków, które zawierają kompletny opis rozumowania. Podobne odczucie mam także w stosunku do streszczenia umieszczonego na początku rozprawy. Zawiera ono pojęcia, które stają się zrozumiałe dla czytelnika dopiero po przeczytaniu rozprawy, nie wcześniej, np. *correlation-based pairing*, *interaction-based pairing*, *density-induced tunneling*. Pomimo tych niedogodności zainteresowany czytelnik może znaleźć w rozprawie szczegóły dotyczące prezentowanych obliczeń.

Rozprawa jest powiązana z pięcioma dwuautorskimi pracami, które Autorka rozprawy przygotowała wspólnie ze swoim promotorem, i które zostały wymienione w dodatku E zatytułowanym *Related publications*. Trzy spośród tych prac zostały opublikowane odpowiednio w

*Annals of Physics* (2022 r.), *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* (2022 r.) oraz w *Acta Physica Polonica A* (2023 r.). Niestety ostatnia z prac wymienionych w tym dodatku nie jest dostępna ani we wersji drukowanej, ani w wersji elektronicznej. W trakcie omawiania wyników rozprawy Autorka odnosi się bezpośrednio jedynie do pierwszej z ww. prac, natomiast związek pozostałych prac w wynikami rozprawy nie został precyzyjnie określony.

Pierwszy rozdział rozprawy jest wstępem, w którym bardzo wyraźnie wskazane zostały cel rozprawy oraz analizowane problemy. Kolejne rozdziały udzielają odpowiedzi na pytania postawione we wstępie. Pierwszy rozdział zawiera także omówienie struktury rozprawy oraz wprowadza model Bose-Hubbarda. Podano również precyzyjne i przekonujące uzasadnienie dla wprowadzenia dodatkowego wyrazu w hamiltonianie, który nazwany został *density-induced tunneling (DIT)*, i któremu poświęcona jest znaczna część rozprawy. Dalsza część pierwszego rozdziału zawiera krótkie omówienie modeli i przybliżeń, które są wykorzystywane w rozprawie. Taka struktura wyraźnie oddziela wyniki innych badaczy od oryginalnych wyników Autorki, które zostały prezentowane w kolejnych rozdziałach. Jednak omówienie to jest moim zdaniem zbyt krótkie i wiele istotnych aspektów nie zostało precyzyjnie określonych, np.:

- z niejasnych dla mnie powodów w równaniu (1.2) wprowadzono jawną zależność hamiltonianu od czasu, która nie występuje we wcześniejszych ani w później omawianych równaniach,
- w równaniu (1.10) całą przeskok oznaczono innym symbolem niż w równaniu (1.1),
- rysunek (1.2) prezentuje diagram fazowy jednak nie precyzuje, gdzie poszczególne fazy występują,
- symbol “ $z$ ”, który najprawdopodobniej oznacza liczbę sąsiednich węzłów, i który po raz pierwszy pojawia się poniżej równania (1.27), nie został wyjaśniony,
- równania (1.43) i (1.47) zawierają szereg symboli, których znaczenia można się jedynie domyślać,
- w równaniach (1.37) i (1.38) wprowadzono parametry porządku, nie precyzując o jakie uporządkowanie chodzi.

Tak duża liczba usterek technicznych i niejasności we wstępnej części rozprawy zdecydowanie nie ułatwia jej czytania.

Kolejne rozdziały rozprawy prezentują oryginalne wyniki Autorki. Każdy z tych rozdziałów kończy się krótkim omówieniem, które trafnie podsumowuje najważniejsze wyniki rozdziału i ich znaczenie. W rozdziale drugim badany jest wpływ skorelowanego przeskoku (DIT) na kondensację sparowanych i niesparowanych bozonów, przy czym obliczenia zostały przeprowadzone dla przypadku niezerowej temperatury. Moim zdaniem, najważniejszy wynik tej części rozprawy dotyczy mapowania modelu Bose-Hubbarda ze skorelowanym przeskokiem (DIT) na kwantowy model fazowy (*quantum phase model*) rozszerzony o wyraz opisujący kondensację par bozonów. Podane zostały jawne wyrażenia łączące parametry obu modeli. Uzyskanie wyników ilościowych wymagało ostatecznie zastosowania przybliżenia średniego pola. Wyniki zaprezentowane na rysunkach 2.1 oraz 2.2 pokazują temperaturowe zależności parametrów porządku, ciepła właściwego i entropii. Zakładam, że prezentowana jest entropia podzielona przez liczbę węzłów sieci, ale nie mam takiej pewności. Nie została też podana geometria układu, dla którego zaprezentowano wyniki. Nie znalazłem też jednoznacznego stwierdzenia, że geometria nie wpływa na prezentowane wyniki ilościowe. Umieszczony w rozprawie opis wyników jest kopią opisu z publikacji Autorki, co zostało wyraźnie zaznaczone w rozprawie, jednak budzi to u czytelnika

pewien niedosyt. Przedstawione w tym rozdziale wyniki pokazują, że skorelowany przeskok (DIT) może stabilizować zarówno kondensat sparowanych bozonów, jak i kondensat niesparowanych cząstek zwiększając temperatury, w których pojawiają się obie fazy. Co ciekawe, kondensat par bozonów występuje w szerszym zakresie parametrów modelu i temperatur niż ma to miejsce w przypadku kondensatu niesparowanych bozonów.

W rozdziale trzecim badany jest dyssypatywny wkład do działania, który pojawia się w modelu Bose-Hubbarda rozszerzonym o skorelowany przeskok (DIT). Występowanie tego typu wkładów jest oczekiwane w układach otwartych, które oddziałują z otoczeniem. W modelu analizowanym w rozprawie analogiczny wkład pojawia się w sposób naturalny bez konieczności wyodrębniania podukładu, który odgrywałby rolę termostatu. Obecność tego typu wkładów w opisie układów zamkniętych jest raczej nietypowe. Autorka podaje jednak ciekawą interpretację: wyprowadzony model ma bardzo zbliżoną lecz nieidentyczną strukturę jak model, w którym kondensat par odgrywa rolę otoczenia dla kondensatu niesparowanych bozonów. Ostatnia część trzeciego rozdziału zawiera porównanie wyników numerycznych uzyskanych dla obu tych modeli. Opisany w trzecim rozdziale dyssypatywny wkład do działania jest ciekawy, nieintuicyjny i z pewnością warto jest poświęcić mu więcej uwagi w trakcie przyszłych badań. W szczególności istotne pytanie dotyczy tego, w jakiej klasie przybliżeń tego typu wkład się pojawia. Odnosząc się do pewnych usterek technicznych w tym rozdziale, chciałbym stwierdzić, że nie rozumiem uproszczonego zapisu zastosowanego w równaniu (3.24) ani znaczenia indeksów użytych po lewej stronie równań (3.32) i (3.33).

Czwarty rozdział rozprawy zawiera analizę kondensacji par bozonów w modelu Bosego-Hubbarda bez uwzględnienia skorelowanego przeskoku (DIT). Autorka pokazuje, że również ten model można sprowadzić do rozszerzonego kwantowego modelu fazowego, jednak należy zastosować inne przybliżenie niż miało to miejsce w drugim rozdziale rozprawy, w którym uwzględniony by skorelowany przeskok (DIT). Przybliżenie to polega na przedstawieniu funkcji Greena jako sumy dwóch składowych opisanych równaniami (4.9) i (4.10). Nie jest dla mnie oczywiste, czy to przybliżenie jest jedynie fenomenologicznym podejściem, które prowadzi do oczekiwanego efektywnego modelu, czy można go uzasadnić również bardziej formalnie. Autorka wyraźnie rozróżnia parowanie bozonów w modelu ze skorelowanym przeskakiem bozonów (DIT), które nazywa *interaction-based pairing*, od parowania w modelu bez DIT, które nazywa *correlation-based pairing*. Warto byłoby nieco dokładniej uzasadnić taką terminologię, gdyż oba badane modele opisują układy oddziałujących bozonów, w których występują korelacje wielociałowe. W szczególności nie jest dla mnie oczywiste, czy różnice pomiędzy *interaction-based pairing* oraz *correlation-based pairing* dotyczą badanych modeli czy przybliżeń zastosowanych do ich analizy.

Ostatni rozdział zawiera ciekawe porównanie obu mechanizmów parujących: *interaction-based* oraz *correlation-based*. Mechanizmy te opisywane są w ramach tego samego modelu efektywnego, jednak odpowiadają im inne wartości parametrów modelu. Wykorzystując samozgodne przybliżenie harmoniczne uzyskano wyniki ilościowe dla parowania typu *interaction-based* oraz *correlation-based*. Najciekawsze moim zdaniem wyniki zostały przedstawione na rysunkach 5.2 oraz 5.4. Pokazują one temperaturowe zależności parametrów

porządku oraz ciepła właściwego. Dla niewielkich wartości energii skorelowanego przeskoku ( $J_{\text{DID}}$ ) wyniki uzyskane dla obu mechanizmów parowania wydają się być bardzo zbliżone, jednak przy większych wartościach  $J_{\text{DID}}$  temperatury krytyczne dla parowania typu *interaction-based* stają się zdecydowanie większe. Kondensat par bozonów występuje w węższym zakresie temperatur niż kondensat niesparowanych bozonów, a więc odwrotnie niż to miało miejsce w rozważaniach zaprezentowanych w rozdziale drugim. Można zatem stwierdzić, że wynik ten zależy od zastosowanych przybliżeń. W podsumowaniu rozdziału piątego znajdujemy stwierdzenie, że zachowanie bozonów nie zależy od spinu tak silnie jak ma to miejsce w przypadku fermionów. Analogiczne stwierdzenie było użyte wcześniej w rozdziale drugim. Jest to dość ogólne stwierdzenie i nie jest jasne do jakiego zachowania bozonów się odnosi.

Sporym zaskoczeniem jest brak formalnego zakończenia, które podsumowałoby najważniejsze wyniki całej rozprawy oraz omówiło ich znaczenie w szerszym kontekście prowadzonych obecnie badań, np. dotyczących ultrazimnych gazów. Takiego omówienia nie zawiera ani wstęp (bądź zawiera go w stosunkowo wąskim zakresie), ani krótkie podsumowania kończące poszczególne rozdziały. Można przypuszczać, że rozdział piąty stanowi pewnego rodzaju podsumowanie rozprawy, gdyż poświęcony jest porównaniu wyników omawianych w rozdziałach drugim i czwartym. Jednak taka interpretacja rozdziału piątego nie została jednoznacznie wskazana w rozprawie ani nie wynika z jej struktury.

Uważam, rozprawa doktorska Pani Agaty Krzywickiej prezentuje ciekawe i oryginalne badania teoretyczne przeprowadzone w ramach modelu Hubbarda, które dotyczą współlistnienia kondensatu par bozonów oraz kondensatu niesparowanych bozonów. Autorka uzyskała istotne wyniki ilościowe w drodze obliczeń analitycznych przy minimalnym wykorzystaniu obliczeń numerycznych. W mojej ocenie rozprawa doktorska Pani Agaty Krzywickiej spełnia wszystkie kryteria wymienione w Ustawie Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce. Z tego powodu wnioskuję o przyjęcie rozprawy i dopuszczenie jej Autorki do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Marin Mienjewski