

Kraków, 09 czerwca 2022

**Recenzja rozprawy doktorskiej pana mgr. Karola Kawy
pt.: „Dynamika wzbudzenia w układzie kwantowym
z silnym nieporządkiem i sprzężeniem dalekiego zasięgu”**

Przedłożona do recenzji rozprawa doktorska pana mgr. Karola Kawy, pt. „Dynamika wzbudzenia w układzie kwantowym z silnym nieporządkiem i sprzężeniem dalekiego zasięgu”, została przygotowana w ramach studiów doktoranckich (w okresie od 2017 do 2022) w Katedrze Fizyki Teoretycznej, Wydziału Podstawowych Problemów Techniki na Politechnice Wrocławskiej. Doktorant wykonał ją pod kierunkiem Promotora prof. dr hab. inż. Pawła Machnikowskiego.

Dysertacja, opracowana w języku polskim, ma charakter teoretyczny i stanowi monograficzne opracowanie Autora. Praca liczy łącznie 121 stron, podzielona jest na 5 rozdziałów, poprzedzonych (nienumerowanymi): *Streszczeniem*, *Abstraktem* (w języku polskim i angielskim), krótkim rysem *Historycznym i motywacją*, *Wprowadzeniem*, omówieniem *Celu, treści i struktury pracy*. Całość zwięźczona jest *Podsumowaniem*, dwoma *Dodatkami* (nt. znajdowania ewolucji czasowej z diagonalizacji hamiltonianu, oraz poziomu saturacji dla różnych rozkładów energii), zbiorem *Wybranych oznaczeń*, *Spisem rysunków*, *Spisem tablic*, opisem *Dorobku naukowego* (zawierającym m.in. listę publikacji naukowych Autora, listę wygłoszonych prezentacji konferencyjnych), *Bibliografią* (zawierającą 63 pozycje), oraz *Podziękowaniami*.

Rozdział pierwszy (pt. *Lokalizacja Andersona*) ma charakter właściwego wprowadzenia do treści przedstawionej w późniejszych częściach. Oznacza to, że prezentuje ugruntowaną wiedzę dot. zagadnienia lokalizacji Andersona. Podane są metody badania „lokalizacji”, z których wynika konieczność lokalizacji w strukturach niskowymiarowych (1D i 2D), oraz przejście metal-izolator indukowane nieporządkiem w przypadku układów 3D. Osobny podrozdział został poświęcony *hipotezie skalowania jednym parametrem*. Początkowo rozważany jest model Andersona, ze sprzężeniem jedynie z najbliższymi sąsiadami. Następnie przedstawiony jest schemat „dyskretyzacji” hamiltonianu metodą liniowej kombinacji orbitali atomowych.

W rozdziale tym, na stornie 16 Autor wprowadza IPR (*inverse participation ratio*), tj. odwrotność stosunku uczestnictwa. Jest to wielkość powszechnie stosowana w badaniu ogólnie rozumianych stanów zlokalizowanych. Moją wątpliwość budzie wzór (1.2) podany



**INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ**

**im. Henryka
Niewodniczańskiego**

**POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK**

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów

jako „definicja” IPR. W ogólności IPR rzędu q , zdefiniowana jest jako (dla przykładu N.C. Murphy *et al.*, Phys. Rev. B **83**, 184205 (2011)):

$$IPR_q(n) = \frac{\sum_r |\langle r|n\rangle|^{2q}}{\sum_r |\langle r|n\rangle|^q},$$

przy czym dla $q=2$ ze względu na normalizację funkcji falowych mamy $\sum_r |\langle r|n\rangle|^2 = 1$ oraz $IPR_2(n) = \sum_r |\langle r|n\rangle|^4$ (w zapisie Autora rozprawy). Ze względów dydaktycznych bardziej stosowne wydaje się podanie przytoczonego wyrażenia, wraz ze stosownym wyjaśnieniem.

W rozdziale tym bardzo pozytywnie, również ze względów dydaktycznych oceniam opis *Metody macierzy transferu* (strona 16) oraz sekcję *Teoria skalowania w lokalizacji* (strona 18). Prostota opisu świadczy moim zdaniem o doskonałym zrozumieniu omawianego zagadnienia przez Autora rozprawy.

Interesująca jest również sekcja *Dyskretyzacja hamiltonianu* (strona 20) – o ile opis jest jasny i klarowny, to przyjęte oznaczenia mogą czasem wprowadzać czytelnika w błąd (musi on zatem uważnie śledzić przyjętą notację). Dla przykładu na stronie 21, Autor podaje pod wzorem (1.26): *sumowanie przebiega po wszystkich z , dla których $a+z$ jest najbliższym sąsiadem a* . W dalszej części, zapis drugiego wyrazu we wzorze (1.27) może sugerować sumowanie po wszystkich z . Dodatkowo drugi wyraz wzoru (1.27) zawiera dwa razy ten sam przeskok – powinien zawierać wyrażenie postaci $|\alpha + z\rangle\langle\alpha| + |\alpha\rangle\langle\alpha + z|$, tj. drugi przeskok w postaci sprzężenia hermitowskiego przeskoku pierwszego. W opisie wzoru (1.28) pojawia się błędne oznaczenia zdefiniowanej wcześniej macierzy przejścia (tzn. jest p_a , powinno być P_a).

Rozdział drugi jest wprowadzeniem do modelu z dalekozasięgowymi sprzężeniami. Autor częściowo prezentuje swoje wyniki teoretycznego, odnosząc się zarazem do wyników znanych z literatury. Autor rozpoczyna rozważania od wprowadzenia pasm energetycznych dla badanego układu, oraz określenia efektywnego nieporządku „odczuwanego” przez cząstkę poruszającą się w sieci. Następnie dyskutowana jest możliwość realizacji stanów zdelokalizowanych w układach niskowymiarowych. Autor bazując na metodzie zaproponowanej przez P. W. Andersona w (Phys. Rev. **109**, 1492 (1958)) znajduje szczytkowe asymptotyczne obsadzenie centralnego węzła, oraz ewolucję obsadzeni pozostałych węzłów. Podejście to jest punktem wyjścia dla dalszych rozdziałów pracy.

W sekcji *Przejście metal-izolator w układach niskowymiarowych*, Autor przytacza wzór (2.17), tj. rozwinięcie pasma energetycznego w środku i na krawędzi pasma, zaczerpnięte wprost z pracy A. Rodriguez *et al.*, Phys. Rev. Lett. **90**, 027404 (2003). Brak mi tutaj wyjaśnienia jak to rozwinięcie zostało uzyskane – taki opis byłby cennym uzupełnieniem. Nasuwa się również pytanie, czy takie rozwinięcie jest zawsze możliwe –



INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ

im. Henryka
Niewodniczańskiego

POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów

np. w przypadku sieci Lieba (gdzie w najprostszym przypadku gęstość stanów zawiera deltę Diraca $\delta(\omega)$, dla $\omega=0$).

W sekcji *Pasma energetyczne w szczególnym przypadku $\mu=d$* (strona 31) zawiera wyprowadzenie relacji dyspersyjnej dla $d=1$, tj. wzór (2.20) – bazuje on na wzorze (2.11), jednak zawiera inne oznaczenia, co może utrudniać czytanie tekstu. Dla równowagi, we wzorze (2.30), Autor powraca do początkowej formy zapisu.

W rozdziale tym podoba mi się podejście Autora, zmierzające do uogólnienia podejścia Andersona do układów niskowymiarowych (wprowadzone w sekcji *Równanie ruchu* na strona 35 i zastosowane w dalszych sekcjach). Rozdział ten oceniam bardzo wysoko – świadczy on o biegłości Autora w zastosowaniu obliczeń analitycznych (dokładnych, jak i przybliżonych). Pozytywnie oceniam komentarze Autora, dotyczące przeprowadzonych obliczeń. Przytrafiło się tu jednak parę niezręczności: zamiast słowa *człon* (np. opis równania (2.53)) sugeruje stosować słowo *wyraz*, zamiast wyrazu *opróżnianie* (opis pod wzorem (2.56)) sugeruje stosować lepiej brzmiące sformułowanie np. *zmiana/redukcja obsadzenia*. Pojawiają się dobre błędy edycyjne, np. opis równania (2.17b) na stronie 31 zawiera dwa razy słowo *krawędź*; strona 46 nad wzorem (2.100): *zob. Rys. 2.3(b) lub Rys. 2.2(b)* – zwyczajowo zaczyna się od rys. wcześniejszego; strona 47 nad wzorem (2.103): *zob. Rys. 2.3(c) lub Rys. 2.3(c)* – zakładam, że autor miał na myśli rys. 2.2(c).

Rozdział trzeci koncentruje się na dynamice średniego przemieszczenia kwadratowego, uzyskane numerycznie dla układu 1D oraz 2D ze sprzężeniem $V(r) \sim 1/r$. Obliczenia numeryczne były przeprowadzone na sieci regularnej ograniczonej „sferą” o promieniu R . Ponadto, podany jest również przybliżony opis analityczny omawianych zagadnień (w ogólnej postaci dla d wymiarowej sieci).

W rozdziale tym, relatywnie nieczytelnie prezentuje się Tabela 3.1 zawierająca wartości całek I_1 (3.21) oraz I_2 (3.27). Rys. 3.3, 3.5, oraz 3.7 mogłyby być w większej skali (podobnie jak np. rys. 3.4).

Rozdział ten bazuje na wynikach opublikowanych przez Autora wraz z Promotorem w Phys. Rev. B **102**, 174203 (2020), i przybliża wiele oryginalnych wyników, z których najważniejszym jest w mojej opinii opis *potrójnej dynamiki dyfuzji* – istnienie trzech skali czasowych: z dynamiką zależną od kwadratu czasu (transport balistyczny), zależną liniowo od czasu (normalna dyfuzja), oraz fazy wysyczonej (saturacja, w której transport ustaje). Każda z wymienionych faz, jest omawiana każdorazowo w kontekście każdej sekcji, co ułatwia odnajdywanie się w tekście. Opis ten jest istotny również, ze względu na jego wykorzystanie w rozdziale czwartym i piątym.



INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ

im. Henryka
Niewodniczańskiego

POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów

Rozdział czwarty prezentuje wyniki dotyczące rozprzestrzeniania się korelacji pod wpływem *local quench* (lokalnego „przełączenia”/zmiany) w silnie niejednorodnym 1D układzie spinów. Źródłem zaburzenia jest tutaj obrócenie pojedynczego (centralnego) spinu. W przypadku takim, wzbudzenie rozprzestrzenia się wewnątrz układu, powodując powstanie korelacji pomiędzy poszczególnymi spinami, a spinem centralnym. Podobnie jak poprzednio, Autor zakłada dalekozasięgowe sprzężenie pomiędzy atomami, postaci $V(r) \sim 1/r^4$. Poprzez transformację hamiltonianu opisującego system, do postaci badanej wcześniej, umożliwiają Autorowi odtworzyć jakościowo oraz ilościowo dynamikę korelacji w badanym układzie. Następnie badany jest charakter propagacji, poprzez śledzenie „frontu falowego” korelacji. Autor postuluje istnienie stożka świetlnego (w płaszczyźnie czas-położenie), który określa obszar poza którym korelacje gwałtownie spadają do zera. Rozdział ten bazuje na wynikach prezentowanych przez Autora wraz z Promotorem w artykule arXiv:2106.08240 (opublikowanym w maju br. w Phys. Rev. B **102**, 174203 (2020)).

Rozdział rozpoczyna się obszernym opisem, przybliżającym zasadność prowadzonych badań w kontekście wyników znanych z literatury (głównie prac E.H. Lieb and D.W. Robinson, Commun. Math. Phys. **28**, 251 (1972) oraz D.W. Robinson, J. Aust. Math. Soc. B **19**, 387 (1976) dot. skończonej prędkości rozchodzenia się informacji w układzie kwantowym). Badania prowadzone są w 1D układzie spinów; na stronie 69 Autor pisze: *Początkowo układ jest w stanie całkowicie spolaryzowanym, tj. wszystkie spiny są zwrócone ku górze (zob. Rys. 4.1 oraz równanie (2.2)).* – jednak rys. 4.1 prezentuje schematycznie układ już po „przełączeniu” jednego ze spinów (panel a) oraz po pewnym czasie t gdy sąsiednie spiny zmieniają już swój kierunek (panel b). Rozdział kończy się dwoma rysunkami – w moim odczuciu korzystniej byłoby umieścić je bliżej miejsc gdzie są opisywane w tekście.

Rozdział zawiera wiele bogatych opisów, które dogłębnie wyjaśniają omawiane zagadnienia. Uzyskane wyniki dot. istnienia stożka świetlnego są w mojej opinii istotnym wkładem Autora o dużym znaczeniu w skali światowej.

Rozdział piąty prezentuje teoretyczne rozważania nad dyfuzją pojedynczego ekscytonu w 2D zespole kropek kwantowych rozmieszczonych losowo na kołowej masie. Autor w rozdziale tym stara się teoretycznie opisać system realizowany w ramach badań eksperymentalnych, tj. 2D zespół kropek kwantowych. Podobnie jak w poprzednim przypadku, rozdział rozpoczyna się obszernym wprowadzeniem do omawianego zagadnienia. Podobnie jak poprzednio, Autor przeprowadził symulacje numeryczne (sekcja *Wyniki symulacji numerycznych*, strona 89) oraz przybliżone obliczenia analityczne (sekcja *Przybliżone rozwiązania analityczne*, strona 94). W obu sekcjach, występuje jasny podział, który jest wzmocniony przez wprowadzenie podsekcji – co zdecydowanie ułatwia



INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ

im. Henryka
Niewodniczańskiego

POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów

czytanie, jak i porównywanie uzyskanych wyników. Uzyskane wyniki są jakościowo spójne z prezentowanymi w rozdziale trzecim.

Rozprawa przygotowana jest schludnie, a wykresy są czytelne. Nie jest jednak ona wolna od paru niedociągnięć edycyjnych (wspomnianych we wcześniejszych paragrafach recenzji), które jednak nie obniżają jej walorów naukowych czy merytorycznych. Bibliografia (strona 115) przyjmuje formę dosyć nietypowego odwołania do referencji, w postaci: *Autor, Tytuł, Czasopismo, Tom, Wolumen, Strony, Rok, DOI*. Przyjęta forma nie jest zastosowana we wszystkich rekordach, czasem referencje posiadają zapis *Strona od-do*, inne tylko nr. pierwszej strony – korzystniej byłoby przyjąć jednolitą formę. Autor podaje zazwyczaj pełną nazwę Czasopisma, przy czym odstępstwem jest Ref. 11 odwołujące się do *EPL* (w rozprawie zapisane w formie *Epl*), tj. *Europhysics Letters*. Link DOI w Ref. 4 jest błędny (jest DOI: 10.1017/CBO9781107415324.002, powinno być DOI: 10.1103/PhysRev.109.1492). Zastanawiający jest również relatywnie mały zbiór referencji do których odnosi się Autor – lista liczy 68 pozycji, co stanowi bardzo małą liczbę jak na aktualnie badane zagadnienie (bazujące m.in. na pracy P.W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958) – cytowanej 9189 razy, oraz A. Rodriguez *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 027404 (2003) – 94 cytowania).

Cel pracy zdefiniowany jest poprzez jedną sentencje (strona 13), i dotyczy *określenia oraz teoretycznego wyjaśnienia dynamiki cząstki kwantowej w układzie z silnym nieporządkiem, oraz dalekozasięgowymi sprzężeniami*. Jest on ściśle określony, i bez wątplenia przez Autora osiągnięty. W szczególności rozprawa wnosi istotny wkład w rozumieniu układów z silnym nieporządkiem i w obecności dalekozasięgowego sprzężenia postaci $V(r) \sim 1/r$ lub $1/r^d$.

Pan mgr Karol Kawa jest współautorem czterech artykułów naukowych – na dzień sporządzania recenzji dwie prace na których oparta jest rozprawa opublikowane są w *Phys. Rev. B*, kolejne dwie dodatkowe: jedna opublikowana w *J. Phys.: Condens. Matter* oraz druga w recenzji w *Phys. Rev. B*. Są to czasopisma dobrze znane i rozpoznawalne w środowisku fizyków teoretyków badających zagadnienia z zakresu ogólnie rozumianej fizyki ciała stałego. Autor rozpraw wielokrotnie prezentował swoje wyniki na konferencjach międzynarodowych (siedem razy w postaci posterów) oraz na jednej konferencji krajowej. Wygłosił również trzy seminaria w swojej macierzystej jednostce. Dodatkowo odbył staż naukowy w grupie prof. Tilmanna Kuhna w Westfalskim Uniwersytecie Wilhelma w Munster (Wielka Brytania) – staż finansowany przez Narodową Agencję Wymiany Akademickiej (NAWA). Był również beneficjentem



**INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ**

**im. Henryka
Niewodniczańskiego**

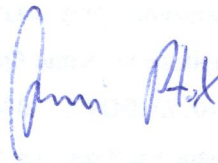
**POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK**

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów

stypendium w ramach programu Narodowego Centrum Nauki (NCN) – grant NCN BEETHOVEN uzyskany przez promotora, prof. dr hab. inż. Pawła Machnikowskiego.

Podsumowując, recenzowana rozprawa doktorska p. mgr Karola Kawy przedstawił w rozprawie oryginalne rozwiązanie problemu naukowego, udokumentowane dwoma artykułami w Phys. Rev. B. Rozprawa spełnia zatem ustawowe i zwyczajowe kryteria stawiane rozprawom doktorskim w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauk fizycznych. W związku z powyższych wnoszę o dopuszczenie pana mgr. Karola Kawy do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



**INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ**

im. Henryka
Niewodniczańskiego

**POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK**

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptak,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów