

### Recenzja rozprawy doktorskiej mgra Damiana Włodzyńskiego

Oceniana przeze mnie rozprawa doktorska „Problem małego polaronu fermionowego w jednowymiarowej pułapce harmoniczej” napisana została przez mgra Damiana Włodzyńskiego pod opieką dr hab. Tomasza Sowińskiego w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk. Wyniki przedstawione w rozprawie zostały opublikowane w renomowanych czasopismach naukowych.

W ostatnich latach kontrola eksperymentalna małych zespołów atomowych, a nawet pojedynczych atomów, osiągnęła wysoką precyzję. Osiągnięcia te zostały uhonorowane Nagrodą Nobla w 1997 „Za rozwój metod chłodzenia i pułapkowania atomów laserem”, w 2012 „Za przełomowe eksperymentalne metody, które umożliwiają pomiar i manipulację pojedynczych układów kwantowych” oraz w 2018 „Za pęsety optyczne i ich zastosowanie w systemach biologicznych”. Oprócz metod kontroli małych układów atomowych rozwinęły się również techniki detekcji pojedynczych atomów oraz precyzyjne metody optyczne pozwalające kontrolować stany wewnętrzne atomów.

Wyżej wspomniane techniki umożliwiły wytwarzanie, kontrolę i pomiar układów kilkuatomowych wraz z kontrolą efektywnej siły oddziaływania międzyatomowego oraz realizację wyrafinowanych przestrzennie konfiguracji sił zewnętrznych, działających na atomy.

Pozwala to na wytworzenie potencjałów tzw. sieci optycznych umożliwiających realizację modelowych Hamiltonianów ciała stałego lub potencjałów ściskających realizujących układy z dwoma albo jednym wymiarem przestrzennym.

Jednym z przykładów realizacji takiego układu jest omawiany w rozprawie doktorskiej tzw. układ małego polaronu fermionowego. Jest to układ kilku identycznych, nieoddziałujących atomów fermionowych (atomów morza Fermiego) oddziałujących z pojedynczym, odróżnialnym od pozostałych, atomem nazywanym atomem domieszki. Wszystkie atomy poddane są działaniu sił zewnętrznych tworzących efektywnie układ jednego wymiaru przestrzennego. Jednocześnie wykorzystanie metod optycznych umożliwiło pomiar parametru związanego bezpośrednio z energią tego układu.

Jednym z celów recenzowanej rozprawy było wyznaczenie wyżej wspomnianego parametru, w celu porównania przewidywań teoretycznych z pomiarami eksperymentalnymi.

Standardowo, do badań teoretycznych układów wielodziałowych wykorzystuje się różnego typu metody przybliżone np. metoda Hartree-Focka w przypadku fermionów lub metodę Bogoliubowa w przypadku ultrazimnych rozrzedzonych gazów bozonowych. Metody takie

mają liczne zalety, ale też mają jedną zasadniczą wadę. Stosowane w nich przybliżenie jest przeważnie słabo kontrolowalne.

Z tego też powodu rozwiązania pełnych nieprzybliżonych Hamiltonianów są bardzo ważne. Jak można się spodziewać, tylko w wyjątkowych przypadkach udaje się znaleźć rozwiązanie analityczne problemu. W przeważającej większości układów skazani jesteśmy na rozwiązanie numeryczne.

W tym przypadku popularne są metody Monte Carlo, które zostały z sukcesem użyte do przewidywania różnych własności układów wielociałowych. Przykładem są wyznaczone numerycznie własności przemiany  $\lambda$  w nadciekłym helu. Innym imponującym przykładem jest wyznaczenie teoretyczne różnic mas protonu i neutronu wychodząc z Hamiltonianu chromodynamiki kwantowej.

W wyżej wspomnianych metodach funkcja falowa układu jest „obliczana” za pomocą próbkowania przy użyciu metody Monte Carlo. Obserwable uzyskuje się wyniku uśrednienia po wielu realizacjach stochastycznych. Jest to jak na razie jedyna możliwość, gdyż znalezienie numeryczne postaci funkcji w tak wielu wymiarach jest zbyt złożone numerycznie oraz zbyt „pamięcio-chłonne”.

Jednak w przypadku układów kilku-ciałowych możliwości obecnych komputerów umożliwiają znalezienie wielodziałowej funkcji falowej. Procedura numeryczna znajdowania wielociałowych stanów własnych Hamiltonianu nosi nazwę „metody ścisłej diagonalizacji”. Jednym z najbardziej spektakularnych przykładów użycia tej metody są prace grupy prof. Pachuckiego wyznaczające energie fotonów emitowanych przy przejściach między poziomami energetycznymi w atomach helu i litu, będących w zgodności z wynikami doświadczalnymi, z dokładnością do kilkunastu cyfr znaczących.

Autor rozprawy wykorzystuje wyżej wspomnianą metodę do znalezienia własności układu małego polaronu fermionowego w jednym wymiarze przestrzennym. Aby sprostać temu trudnemu zadaniu istotnie modyfikuje znaną wersję metody. Ta modyfikacja metody ścisłej diagonalizacji jest głównym osiągnięciem autora rozprawy.

Autor stosuje mieszany zapis – część Hamiltonianu opisujących fermiony tworzące morze Fermiego zapisywana jest w formalizmie drugiej kwantyzacji zaś część opisującą domieszkę w formalizmie pierwszej kwantyzacji. Użycie języka drugiej kwantyzacji w pełni wykorzystuje symetrię jaką niesie ze sobą nierozróżnialność cząstek.

Dodatkowo autor wykorzystuje istotną własność potencjału harmonicznego. W takim potencjale Hamiltonian układu separuje się na część związaną z ruchem środka masy oraz część związaną z ruchem względnym atomów (ściśle rzecz biorąc jest to ruch atomów morza Fermiego względem atomu domieszki). Okazuje się, że Hamiltonian ruchu względnego atomów morza Fermiego opisuje oddziałujące fermiony, znajdujące się w zewnętrznym potencjale, na który składa się część oscylatora harmonicznego oraz część opisującą oddziaływanie atomów morza Fermiego ze spoczywającą, w środku pułapki harmoniczej, niejednorodnością.

Taki Hamiltonian ruchu względnego autor diagonalizuje numerycznie. W tym celu standardowo uwzględnia w opisie tylko skończoną liczbę orbitali jednocząstkowych na których rozpina się stan wielocząstkowy. W swojej rozprawie autor podaje sensowny

warunek wyboru optymalnej liczby orbitali – takiej przy której rozwiązanie numeryczne jest „niedalekie” od rozwiązania ścisłego. Ta liczba orbitali bezpośrednio przekłada się na rozmiar diagonalizowanej macierzy Hamiltonianu a więc na kluczowy parametr, który informuje czy dany problem da się rozwiązać numerycznie przy pomocy obecnie dostępnych komputerów. Część rozprawy poświęconej zagadnieniu złożoności numerycznej autor kończy porównaniem złożoności dwóch metod ścisłej diagonalizacji: pierwszej bez użycia separacji środka masy oraz drugiej korzystającej z tej separacji. Korzystając z porównania metod autor znajduje obszar parametrów dla którego użycie metody korzystającej z separacji środka masy jest korzystniejsze numerycznie. Jest to reżim ciężkiej domieszki oraz silnego oddziaływania pomiędzy atomami morza Fermiego i atomem domieszki.

Metoda separacji środka masy skutkuje nie tylko zyskiem numerycznym. Okazuje się, że potencjał oddziaływania międzyatomowego występującego w Hamiltonianie ruchu względnego atomów jest praktycznie odwrotnie proporcjonalny do masy domieszki. To jasno pokazuje że układ staje się słabo-oddziałujący dla ciężkiej domieszki, co tłumaczy opisany powyżej zysk numeryczny w tym reżimie.

W dalszej części pracy autor prezentuje wyniki obliczeń numerycznych. Są to energie stanów własnych Hamiltonianu oraz gęstości jednocząstkowe atomów morza Fermiego i domieszki dla tych stanów. W tym miejscu następuje porównanie wyników teoretycznych z pomiarami doświadczalnymi wielkości bezpośrednio związanej z energią stanów własnych układu. Zgodność pomiędzy teorią a doświadczeniem jest zadziwiająco dobra i jest pięknym podsumowaniem pracy wykonanej nad analizą teoretyczną układu.

Opisane wyżej wyniki oceniam bardzo pozytywnie. Autor wykazał się pomysłowością i bardzo dobrym warsztatem teoretycznym przy wyprowadzaniu uogólnionej transformacji Lee-Low-Pine służącej do separacji środka masy od reszty stopni swobody układu. Bardzo pozytywnie oceniam samą rozprawę. Jest napisana w sposób zrozumiały, precyzyjnym i ładnym językiem. Autor dokładnie opisuje wyprowadzenia metody oraz prezentowane wyniki. Muszę powiedzieć że czytanie tej rozprawy było dla mnie przyjemnością.

Podsumowując stwierdzam, że przedstawiona mi do recenzji rozprawa doktorska spełnia, wymogi Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz.U. 2018 poz. 1668).

Rozprawa stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego z dziedziny fizyki zimnych gazów, a także świadczy o ogólnej wiedzy Kandydata w tym zakresie oraz o jego umiejętności samodzielnego prowadzenia pracy naukowej. Wnoszę o dopuszczenie mgra Damiana Włodzyńskiego do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Paweł Zi