

dr hab. Krzysztof Wohlfeld
Instytut Fizyki Teoretycznej
Uniwersytet Warszawski
ul. Pasteura 5, 02-093 Warszawa
krzysztof.wohlfeld@fuw.edu.pl
<http://www.fuw.edu.pl/~kwohlfeld>

Warszawa, 26.2.2021

**Recenzja pracy doktorskiej p. Macieja Kozarzewskiego
pt. „Transport properties of disordered chains
with many-body interactions”**

Przedstawiona przez p. Kozarzewskiego praca dotyczy problemu lokalizacji wielociałowej (*many-body localisation* – MBL), tzn. sytuacji w której oddziaływanie i nieporządek prowadzą do lokalizacji, co z kolei skutkuje brakiem termalizacji układów MBL. Aczkolwiek nie jest to tutaj najbardziej istotne, to warto zaznaczyć, że duże zainteresowanie układami MBL jest spowodowane nie tylko nadal nierozwiązanymi problemami z nimi związanymi (*vide* dyskusja poniżej), ale również ich potencjalnym zastosowaniem w komputerach kwantowych.

Praca składa się ze streszczenia, pięciu rozdziałów, podsumowania, dodatku oraz bibliografii. Rozprawa rozpoczyna się dwoma wstępnymi rozdziałami. W pierwszym rozdziale omówione zostały podstawowe zagadnienia, istotne do zrozumienia przedstawionej tutaj fizyki: izolator Motta, lokalizacja Andersona, wspomniany już wyżej MBL, pojęcie lokalnych całek ruchu, jak również hamiltoniany dwóch podstawowych modeli używanych w tej dziedzinie (oddziałujących bezspiniowych fermionów wraz z nieporządkiem oraz modelu Hubbarda z nieporządkiem). Kolejno, w rozdziale drugim, opisane zostały główne metody numeryczne pozwalające na uzyskanie przedstawionych później wyników. Jako, że kluczowym problemem niniejszej pracy jest policzenie ewolucji czasowej stanu układu $|\psi(t)\rangle$ (przygotowanego w konkretnym stanie w tzw. chwili początkowej $t = 0$), zastosowane metody to: (i) algorytm Rungego-Kutty pozwalający na rozwiązanie zależnego od czasu równania Schrödingera dla $|\psi(t)\rangle$, (ii) metoda wielomianów Czebyszewa wyliczająca ewolucję czasową $|\psi(t)\rangle$ przy użyciu operatora ewolucji czasowej, (iii) dokładna diagonalizacja hamiltonianu układu pozwalająca wyliczyć $|\psi(t)\rangle$ poprzez rozkład w stanach własnych układu. Warto zwrócić uwagę, że metoda (iii), aczkolwiek typowo dość złożona numerycznie, może okazać się jedyną dopuszczalną w przypadku próby znalezienia stanu układu w „odległych czasach”.

Nowe wyniki pracy zostały przedstawione w trzech rozdziałach. I tak w rozdziale trzecim zaproponowano w jaki sposób zidentyfikować można czy dany układ znajduje się w fazie MBL czy też nie (co często nie jest prostym zadaniem). W tym celu do typowego modelu wykazującego przejście do fazy MBL, tzn. jednowymiarowego modelu bezspiniowych fermionów z krótkozasięgowym oddziaływaniem i nieporządkiem, dodano stałe zewnętrzne pole elektryczne (w formie tzw. minimal coupling). Następnie przy użyciu metody Rungego-Kutty wyliczono ewolucję czasową układu przygotowanego w konkretnym stanie. „Centralnym obiektem”, który obliczono, jest zależność czasowa prądu (oznaczona jako I_t w pracy). Okazało się, że faktycznie funkcja I_t zachowuje się jakościowo różnie w zależności od tego czy parametry układu pozwalają na fazę MBL czy też

nie (główną różnicą jest zmiana zależności częstotliwości oscylacji od wielkości przyłożonego pola elektrycznego). Jest to użyteczny wynik, mogący mieć zastosowanie w doświadczeniu – aczkolwiek tutaj pojawia się pytanie na ile jest on zależny od przyjętego modelu? Czy dla innych modeli opisujących przejście do fazy MBL będzie faktycznie podobnie?

Rozdział czwarty stanowi „serce pracy”. Jego głównym celem jest wytłumaczenie zaobserwowanego uprzednio faktu, że dla modelu Hubbarda z nieporządkiem w ładunkowych stopniach swobody, faza MBL nie realizuje się w pełni: tzn. spin jest prawdopodobnie zdelokalizowany. W tym celu, „zapisując” oddziaływania Hubbarda w bazie stanów Andersona oraz odrzucając możliwości przemieszczania się cząstek w stanach Andersona, wyprowadzony został efektywny model spinowy. Kluczową cechą modelu spinowego jest wyprowadzona zależność funkcyjna rozkładu prawdopodobieństwa zmiennej opisującej wielkość oddziaływania pomiędzy spinami (tzw. J). Jej postać tłumaczy „subdyfuzję” naturę czasowej zależności lokalnej funkcji korelacji pomiędzy spinami $\propto t^{-\alpha}$, gdzie parametr $\alpha < 0.5$ jest w pierwszym przybliżeniu dany przez iloraz charakterystycznej długości związanej z lokalizacją Andersona (λ) przez średnią odległość pomiędzy losowo ułożonymi spinami w łańcuchu (d) – jest to, w moim mniemaniu, najważniejszy wynik tego rozdziału (a pośrednio też i całej pracy). Uzyskany wynik został jeszcze dokładniej wytłumaczony przy pomocy idei zwanej „single weak link” oraz sprawdzony poprzez porównanie z symulacjami dla pełnego modelu (tzn. modelu Hubbarda z nieporządkiem).

Zanim omówię kolejne części pracy, pozwolę sobie zadać dwa pytania, które to nasunęły mi się po lekturze rozdziału czwartego: (i) Jak intuicyjnie zrozumieć fakt, że efektywne oddziaływanie jest ferromagnetyczne, a nie np. antyferromagnetyczne? (Czy mamy tutaj do czynienia z podobnym mechanizmem jak oddziaływanie Hunda w atomach?) (ii) Czy wiadomo czemu, w dużej mierze, przedstawione wyniki wydają się również obowiązywać w przypadku dużej gęstości spinów w łańcuchu (tzn. małej średniej odległości między spinami) i dużego nieporządku?

Zarówno rozdział piąty jak i dodatek A stanowią pewnego rodzaju „spin-off” wyników przedstawionych w rozdziale czwartym. Otóż rozdział piąty dotyczy próby odpowiedzi na pytanie czy również ładunek, mimo wszystko, nie lokalizuje się w pełni w modelu Hubbarda z nieporządkiem. Faktycznie, można się spodziewać, że uwzględnienie przemieszczenia się cząstek w stanach Andersona mogłoby dać pewne „resztkowe” oddziaływania pomiędzy ładunkami i spinami, mogące prowadzić również do pewnej (pewnie bardzo małej dla dużych λ) delokalizacji ładunku. W tym celu obliczona została zależność czasowa energetycznej funkcji korelacji (w efektywnym modelu spinowym) oraz przewodności (dla modelu Hubbarda). Ze względu na konieczność obserwacji zachowania tychże wielkości dla „długich czasów” oraz dla odpowiednio dużych układów uzyskanie konkluzyjnych wyników wydaje się dość trudne. Tym niemniej wydaje się, że nie można wykluczyć, iż interesujące nas tutaj funkcje korelacji w granicy termodynamicznej mogą zniknąć dla długich czasów. Oznaczałoby to brak pełnego MBL w badanym modelu – również dla ładunkowych stopni swobody.

Nieco inne podejście do problemu istnienia MBL w danym układzie zostało przedstawione w dodatku. Idea opiera się na znalezieniu lokalnych całek ruchu w danym układzie. Następnie porównuje się tak uzyskaną liczbę całek ruchu z ich maksymalną możliwą liczbą w danym układzie – jeśli dostajemy równość to wówczas w układzie zachodzi MBL. W dodatku przedstawiono po krótko metodę pozwalającą na znalezienie odpowiednich całek ruchu oraz pokazano, że liczba znalezionych całek ruchu jest „zbyt mała” dla modelu Hubbarda z nieporządkiem w ładunkowych stopniach swobody (i jedynie dodanie nieporządku również w spinach pozwala na osiągnięcie MBL).

Powyżej streściłem krótko najważniejsze, w moim odczuciu, wyniki rozprawy doktorskiej oraz zadałem parę pytań dotyczących fizyki przedstawionej w niniejszej pracy – co do których chciałbym aby doktorant ustosunkował się podczas obrony. Teraz przejdę do ogólnej **oceny rozprawy doktorskiej**:

W mojej opinii jednym z głównych problemów w rozważanej tutaj dziedzinie jest próba od-

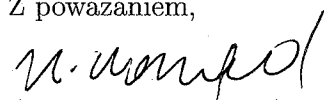
powiedzi na pytanie czy układ dany pewnym modelowym Hamiltonianem, z oddziaływaniem i nieporządkiem, faktycznie jest typu MBL. Istotnie, jak to opisane powyżej, p. Kozarzewski stawia takie pytanie w pracy i na przykładzie jednowymiarowego modelu Hubbarda pokazuje, że odpowiedź na to pytanie może być dość subtelna. Otóż może zaistnieć sytuacja, iż co prawda ładunek elektronu „się zlokalizuje” to jednak spin nadal będzie niezlokalizowany. Aczkolwiek, w pewnym stopniu wynik taki był sugerowany przez jednego ze współpracowników doktoranta, to jednak rezultaty przedstawione w niniejszej pracy pozwalają na zdecydowanie lepsze zrozumienie problemu – w moim odczuciu stanowi to główny wkład niniejszej rozprawy doktorskiej w rozwój badań dot. problemu MBL. *Nota bene*, jak już zresztą zostało to wspomniane powyżej, zagadnienie to stanowi „leitmotiv” pracy doktorskiej, bowiem zostało ono omówione nie tylko w „centralnym” rozdziale czwartym, ale również w rozdziale piątym oraz dodatku (jedynie rozdział trzeci dotyka innego problemu).

Warto następnie podkreślić, że uzyskane wyniki zostały opublikowane w postaci dwóch „zwykłych” publikacji w *Physical Review B*, jednego „Rapid Communication” w *Physical Review B* oraz jednego „listu” w *Physical Review Letters*. Oznacza to, że otrzymane wyniki nie tylko zostały zaakceptowane jako „wiarygodne” przez ekspertów, ale też zostały one uznane za wystarczająco ciekawe by móc zostać opublikowane w naprawdę dobrych czasopiśmie. Dodatkowo, we wszystkich tych przypadkach jest jedynie trzech współautorów prac (doktorant, promotor oraz Peter Prelovšek z Lublany), przy czym p. Kozarzewski jest pierwszym autorem aż trzech spośród czterech prac. Co prawda już te fakty wskazują na to, że mamy do czynienia z bardzo solidnymi wynikami, które w moim odczuciu zdecydowanie przewyższają przeciętne wyniki uzyskane podczas doktoratów w Polsce, to jeszcze warto zaznaczyć, iż prace te uzyskały całkiem sporo cytowań: łącznie jest to około 70 (bez autocytowań) dla wszystkich prac, co jest doskonałym wynikiem.

Również styl przedstawienia wyników w rozprawie doktorskiej jest bardzo zadowalający. Praca jest krótka, ale treściwa, tzn. dokładnie opisuje to co konieczne nie zawierając nieistotnych, i potencjalnie utrudniających czytanie, dyskusji. Dla porządku dodam, że rozprawa zawiera pewną liczbę literówek i niezręczności językowych – jednakże w mojej opinii jest to sprawa całkowicie drugorzędna, która nigdy nie powinna mieć wpływu na ocenę rozprawy doktorskiej w naukach ścisłych.

Podsumowując, stwierdzam, że przedstawiona rozprawa doktorska z naddatkiem spełnia wszystkie wymogi formalne stawiane tego typu pracom. W związku z tym wnioskuję o **dopuszczenie do dalszych etapów przewodu doktorskiego oraz proponuję rozważyć jej wyróżnienie.**

Z poważaniem,



/Krzysztof Wohlfeld/