INSTYTUT FIZYKI JĄDROWEJ
im. Henryka Niewodniczańskiego
POLSKIEJ AKADEMII NAUK

dr hab. Katarzyna Górska

Kraków, 27/09/2022

Instytut Fizyki Jądrowej im. H. Niewodniczańskiego
Polskiej Akademii Nauk
ul. Radzikowskiego 152, 31-342 Kraków
email: katarzyna.gorska@ifj.edu.pl

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Damiana Kołaczka
"Dynamika stanów kwantowych w przestrzeni fazowej"

Rozprawa doktorska Pana mgr. Damiana Kołaczka została wykonana na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo Hutniczej (AGH) w ramach Interdyscyplinarnych Studiów Doktoranckich Fizyczne, Chemiczne i Biologiczne Podstawy Inżynierii Materiałowej (FCB) i była przygotowywana pod kierunkiem dwóch promotorów: dr hab. Bartłomieja Spisaka, prof. AGH, z Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej (AGH) w Krakowie oraz dr hab. Michała Wojtylaka, prof. UJ, z Wydziału Matematyki i Informatyki Uniwersytetu Jagielońskiego (UJ). Rozprawa liczy 103 strony, składa się z 6 rozdziałów, dodatku matematycznego oraz bibliografii. Jak wynika z bibliografii, dorobek naukowy mgr D. Kołaczka, wykorzystany w przygotowaniu rozprawy to 3 artykuły naukowe, których współautorem jest Doktorant, oraz Jego praca magisterska.

Rozdział pierwszy ma charakter wstępu. Autor określa, że przewodnim motywem rozprawy doktorskiej jest zbadanie dynamiki izolowanych układów kwantowych w oparciu o numeryczne rozwiązania równania Moyala dla funkcji Wignera. Wyjaśnia także, że dla zrealizowania tak określonego celu wykorzystany jest opracowany i przeanalizowany w rozprawie algorytm oparty na metodzie typu split-operator. Wypunktowuje również swoje oryginalne osiągnięcia zawarte w rozprawie.

W rozdziałach drugim i trzecim Autor w skondensowany sposób omawia podstawy mechaniki kwantowej. I tak, w rozdziale drugim omawia kolejno ujęcie mechaniki kwantowej przy pomocy funkcji falowej oraz operatora gęstości. Natomiast w rozdziale trzecim przedstawia elementy teorii kwantowej w ujęciu przestrzenno-fazowym przy pomocy funkcji Wignera.

Rozdział czwarty jest kluczowym elementem rozprawy. Dotyczy on najprostszej metody numerycznej faktoryzacji kluczowych dla mechaniki kwantowej operatorów wykładniczych, zwanych dalej eksponentami operatorowymi, postaci exp[i t (A + B)] i policzenia związanych z tym błędów: lokalnego i globalnego. Do uzyskania faktoryzacji eksponenty operatorowej Autor stosuje faktoryzację 2-go rzędu (zwanej faktoryzacją Stranga bądź Marchuka-Stranga) polegająca na iloczynach eksponent operatorów A, B oraz A (równanie (144)), bądź faktoryzacji 4- go rzedu, która prócz iloczynu eksponent A i B uwzględnia wyraz mieszany (równanie (271)). W rozdziale tym mgr D. Kołaczek szacuje błąd lokalny i globalny, który pojawia się przy zastosowaniu faktoryzacji 2-go rzędu dla operatora ewolucji odpowiedniego dla równania Moyala, a następnie dla rozpraszania stanu koherentnego na potencjale gaussowskim. Rozdział ten kończy przedstawienie dyskretyzacji transformaty Fouriera koniecznej do wykonania symulacji numerycznych.

Rozdział 5 zawiera opis dynamiki funkcji Wignera w której operator ewolucji o wybranym kroku Δt działa na stan początkowy będący gaussowskim stanem koherentnym bądź superpozycją takich stanów zwaną zdefektowanym stanem kota Schrödingera. Operator ewolucji ma postać funkcji wykładniczej której argumentem jest suma energii kinetycznej i potencjalnej. Funkcja Wignera wyznaczona dla gaussowskich stanów koherentnych ewoluuje w studni potencjalnej: gaussowskiej oraz wykładniczo-potęgowej. W przypadku funkcji Wignera dla zdefektowanych stanów kota Schrödingera rozpatrywany jest potencjał rozproszeniowy dany poprzez pojedynczą gaussowską barierę. Do wyznaczenia operatora ewolucji mgr D. Kołaczek stosuje algorytm bazujący na metodzie split-operator z wykorzystaniem faktoryzacji 2-go oraz 4-go rzędu. Wyniki uzyskane dla każdego z rozważanych potencjałów są zestawione ze sobą oraz omówione. Dalej mgr D. Kołaczek szczegółowo przedstawia oddziaływanie stanu opisanego funkcją Wignera dla zdefektowanego stanu kota Schrödingera z pojedynczą gaussowską barierą potencjału. Rozważa dwa przypadki tunelowania przez barierę cząstki o niższej, a następnie wyższej, energii niż wysokość bariery. Te dwa przypadki nazywa odpowiedniom tunelowaniem poniżej (below barrier penetration, BBP) oraz powyżej (above barier reflection, ARB) bariery.

Rozprawa doktorska pana mgr Dania Kołaczka napisana jest dobrym i zrozumiałym językiem. Czyta się ją bardzo dobrze. Rozumowanie prowadzone jest krok po kroku w sposób jasny dla czytelnika. Autor stawia problem a następnie go rozwiązuje i obrazuje otrzymane rozwiązanie. Oczywiście, jak liczne inne rozprawy młodych naukowców, również i ta zawiera punkty oraz fragmenty które należy pochwalić, a także te które powinno się poprawić. *In plus* podkreślić należy rozdział 4 a w nim twierdzenie 4.2 którego zastosowanie do operatora ewolucji powstającego z równania Moyala ujęte jest w twierdzeniu 4.3. Twierdzenia te pozwalają na oszacowanie błędu lokalnego w metodzie faktoryzacji 2-go rzędu (Stranga). Oszacowanie błędu globalnego w tej metodzie jest podane w twierdzeniu 4.4. Dowód tych twierdzeń świadczą o dużych zdolnościach i umiejętnościach rachunkowych Pana mgr Damiana Kołaczka, jak również o Jego dbałości o tzw. czystość matematyczną. Podkreślam tutaj, że znalezienie oszacowań błędów lokalnego i globalnego w metodzie Stranga jest zadaniem trudnym, z który Doktorant poradził sobie w doskonały sposób. Interesujący wynik przedstawiony jest także w rozdziale 5.3 dotyczący przechodzenia przez pojedynczą barierę potencjału gaussowskiego przez cząstkę o energii większej niż wysokość bariery (ABR). Autor podkreśla, że odbicie nad barierą jest efektem czysto kwantowym widocznym w ramach opisu przestrzenno-fazowego przy pomocy funkcji Wignera i interpretuje to zjawisko jako tunelowanie w przestrzeni pędowej.

Do słabych punktów rozprawy należą nieliczne błędy edytorskie, np. na stronie 21 $\mathbb{N} \cup \{\infty\}$, sum_{p=0}^N = 1, bądź na stronie 36 pojawia się słówko "where". Wyszczególniam także niespójność notacji we wzorach (331) oraz (335); raz bowiem jest napisane C_t natomiast innym razem C(t). Do rozpatrzenia należy błąd na stronie 77 w zdaniu "Jest to związane z faktem, że funkcja N(t) sterująca amplitudą funkcji n_2(x; t) w chwili początkowej przyjmuje wartość 0...". Ze wzoru (333) wynika jednak, że funkcja N(t) = const > 0 w chwili t=0 dla niezerowych odchyleń standardowych σ_x. W twierdzeniach 4.2 raz 4.4 autor, odpowiednio, znajduje górne oszacowania błędów lokalnych i globalnych. Nie rozstrzyga On jednak czy są to ich najmniejsze oszacowania. Ze wzoru (259) wywnioskować można, iż zaproponowany błąd lokalny obliczony w schemacie Stranga dla układu rozproszeniowego w którym stan początkowy (gaussian) rozprasza się na gaussowsiej barierze potencjału nie zależy od wartości średniej położenia x_0 pakietu początkowego. Pozwala to twierdzić o istnieniu lepszego oszacowania błędu lokalnego. Wierzę jednak, że zadanie to jest trudne i może wykraczać poza ramy rozprawy doktorskiej.

Nieczytelne dla mnie są rysunki 3, 4 oraz 5 proszę zatem o ich wyjaśnienie. Sugeruję także aby we wzorze (313) zasygnalizować, że rozważany jest przypadek n = 2. W rozdziale 5.2 mgr D. Kołaczek porównuje wyniki uzyskane przy pomocy faktoryzacji 2-go i 4-go rzędu, patrz rysunki 9, 11, 12 oraz 13. Stwierdzić można, że użycie faktoryzacji 4-go rzędu jest lepsze niż 2-rzędu. Wynik jest dość oczywisty, jednak brakuje mi tutaj zestawienia czasu komputerowego potrzebnego do wygenerowania przedstawionych na tych rysunkach krzywych który usprawiedliwiało by wybór danej metody.

W swoim podsumowaniu, w części poświęconej omówieniu celów badawczych na przyszłość, Pan mgr D. Kołaczek deklaruje "kontynuację badań nad błędem lokalnym oraz globalnym metody split-operator dla innych faktoryzacji". Ufam, że do realizacji tego celu przyda się Doktoratowi bliższe zapoznanie się z obszerną pracą autorstwa G. Dattoli, P. L. Ottaviani, A. Torre, oraz L. Vazquez pod tytułem "Evolution operators equations: integration with algebraic and finite-difference methods. Applications to physical problems in classical and quantum mechanics and quantum field theory" opublikowanej w La Rivista del Nuovo Cimento vol. 20 pp. 1-133 w roku 1997. W pracy tej, będącej rozszerzeniem cytowanej w rozprawie pracy [49], są przedstawione różne sposoby faktoryzacji eksponenty operatorowej exp[t (A + B)], gdzie A i B są operatorami spełniającymi zadane reguły komutacji.

Podsumowując, stwierdzam że przedstawiona mi do oceny rozprawa doktorska Pana mgr Damiana Kołaczka spełnia wszelkie, tak ustawowe (określone w Ustawie z dnia 18 marca 2011 r. o zmianie ustawy — Prawo o szkolnictwie wyższym, ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki oraz o zmianie niektórych innych ustaw (Dz. U. 2011 nr 84 poz. 455)), jak i zwyczajowe wymogi stawiane rozprawom doktorskim i wnioskuję o dopuszczenie Kandydata do dalszych etapów przewodu doktorskiego prowadzonego przed Radą Dyscypliny Nauk Fizycznych Akademii Górniczo-Hutniczej.

Katarzyna Górska