

Imię i nazwisko recenzenta: dr hab. inż. Gniewomir Sarbicki, prof. UMK

2025.XII.31, Toruń
(data i miejsce)

Dane adresowe:

Turystyczna 17

87-134 Czarne Błoto

Recenzja pracy doktorskiej

mgr inż. Dariusz Woźniak
(imię i nazwisko doktoranta)

pod tytułem

*Dynamics of Quantum State in One-Dimensional Open Systems with Random
Perturbation: Phase-Space Approach*

przygotowanej pod kierunkiem:

dr hab. inż. Bartłomieja Spisaka, prof. AGH
(imię i nazwisko promotora)

Podstawa opracowania

Recenzja została wykonana na zlecenie Rady Dyscypliny Nauki fizyczne Akademii Górniczo-Hutniczej im. Stanisława Staszica w Krakowie.

Podstawa prawna art. 187 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce” (z późn. zm.)

Opinia dotycząca przedmiotowej rozprawy doktorskiej zawiera trzy elementy:

1. Ocenę wraz z uzasadnieniem czy rozprawa doktorska prezentuje ogólną wiedzę teoretyczną Doktoranta w dyscyplinie nauki fizyczne;
2. Ocenę wraz z uzasadnieniem czy rozprawa doktorska wykazuje umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej przez Doktoranta ubiegającego się o nadanie stopnia doktora;

3. Ocenę wraz z uzasadnieniem czy rozprawa doktorska stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego.

Charakterystyka i opis rozprawy

Część 1 wprowadza formalizm macierzy gęstości jako rozszerzenie falowego sformułowania mechaniki kwantowej. Motywacja dla tego rozszerzenia omawiana jest w kontekście rozróżnienia pomiędzy stanami czystymi i mieszanymi, a także konieczności opisu otwartych układów kwantowych oddziałujących ze środowiskiem zewnętrznym.

Miałbym następujące uwagi:

1. (str. 5, sekcja 1.1): W oryginalnej definicji *textitstatistical certainty* zaproponowanej przez Fano wykorzystywana jest czystość stanu, co czyni tę definicję niezależną od wyboru bazy. W sposobie, w jaki autor ją definiuje, brakuje odniesienia do konieczności odpowiedniego wyboru bazy pomiarowej. Ponadto definicja stanu mieszanego odwołuje się do stanów po pomiarze, które mogą się różnić w kolejnych pomiarach — analogiczna sytuacja może wystąpić również w przypadku pomiaru stanu czystego w nieodpowiedniej bazie. Naturalna definicja stanu mieszanego w kategoriach pewności statystycznej powinna odnosić się do niemożności jej uzyskania w *jakiegokolwiek* bazie pomiarowej. Wreszcie, stany czyste są elementami ekstremalnymi zbioru stanów kwantowych, który stanowi podzbiór brzegu tego zbioru (podzbiór właściwy dla wymiaru przestrzeni Hilberta większego niż 2).
2. (str. 7): Współczynniki c_n występujące we wzorze (1.8) nie są zdefiniowane. Wydają się one być elementami diagonalnymi macierzy ρ w bazie własnej obserwabli A .
3. (str. 8): Sformułowanie „whether the state still behaves as a mixture or was purified” jest niefortunne, gdyż sugeruje proces puryfikacji (np. przez dylatację lub pomiar). Mniej poetyckie, lecz bardziej precyzyjne sformułowanie „whether the state is mixed or pure” byłoby w tym miejscu właściwsze.
4. (str. 10): Dla poprawnej definicji odwzorowania $\hat{\Phi}$ na schemacie 1.4 konieczna jest możliwość odwrócenia lewej strzałki diagramu. Jest to możliwe przy założeniu, że stan układu złożonego jest stanem produktowym stanu układu i ustalonego stanu środowiska. Bez tego założenia, jeśli dopuści się stany splątane rekonstruujące poprawnie stan brzegowy, odwzorowanie $\hat{\Phi}$ może nie być kompletnie dodatnie.
5. (str. 11, komentarz po równaniu (1.19)): Nie ma potrzeby zakładania ograniczoności operatorów Krausa — wynika ona bezpośrednio z relacji zupełności.

Część 2 poświęcona jest przestrzenno-fazowemu sformułowaniu mechaniki kwantowej. Wprowadzona zostaje transformata Weyla jako odwzorowanie pomiędzy operatorami działającymi w przestrzeni Hilberta a funkcjami zdefiniowanymi na przestrzeni fazowej,

ustanawiając tym samym odpowiedniość pomiędzy formalizmem macierzy gęstości a reprezentacją przestrzenno-fazową.

Szczegółowo omówione zostają własności funkcji rozkładu Wignera, w tym jej interpretacja jako rozkładu quasi-prawdopodobieństwa oraz jej związek z klasycznymi funkcjami gęstości prawdopodobieństwa na przestrzeni fazowej. Rozdział podkreśla podobieństwa i różnice pomiędzy klasycznym równaniem Liouville'a a kwantowym równaniem Moyala opisującym ewolucję czasową funkcji Wignera.

Ponadto w Części 2 przedstawiona zostaje transformata Stratonovicha–Weyla jako bardziej ogólny formalizm, mający zastosowanie do układów złożonych oraz otwartych układów kwantowych. Formalizm ten rozszerza podejście przestrzenno-fazowe poza proste układy zamknięte i stanowi warsztat teoretyczny dla przestrzenno-fazowego opisu dynamiki dyssypacyjnej rozwijanego w kolejnych rozdziałach.

Miałbym następujące uwagi:

1. (str. 17): Litera U , dotychczas oznaczająca transformacje unitarne, zaczyna oznaczać energię potencjalną bez wyraźnego zaznaczenia tej zmiany. W równaniu (2.19) powinno występować E , a nie $\mathcal{E}$. Brakuje również wyjaśnienia, czym są funkcje ψ_n i ψ_m w równaniu (2.20).

Część 3 poświęcona jest podejściu z rozszczepieniem operatora (*split-operator*) do opisu ewolucji czasowej układów kwantowych. Rozdział wprowadza ogólną ideę dekompozycji operatora ewolucji na prostsze składniki, które mogą być traktowane analitycznie lub numerycznie w bardziej efektywny sposób. Podstawy teoretyczne metody omawiane są w odniesieniu do wzorów Trottera oraz Trottera–Suzukiego, które umożliwiają aproksymację wykładnika sumy niekomutujących operatorów przez iloczyn wykładników operatorów składowych. Przedstawione zostają warunki poprawności takich aproksymacji oraz ich rzędy dokładności. Rozdział prezentuje również zastosowanie metody split-operator do dynamiki kwantowej generowanej przez hamiltoniany składające się z części kinetycznej i potencjalnej, ze szczególnym uwzględnieniem reprezentacji tych składników w różnych dziedzinach (przestrzeni położeń i pędów) oraz wykorzystania transformat Fouriera w implementacji numerycznej.

Miałbym następującą uwagę:

1. (str. 23): Równanie (3.3) nie jest wyrażeniem rozwiązania formalnego. Prawdopodobnie autor miał na myśli równanie (3.5) jako formalne rozwiązanie równania (3.3).

Rozdział 4.1 poświęcona jest wyprowadzeniu równania master w formalizmie przestrzenno-fazowym, określanego jako równanie Wignera–Lindblada. Wyprowadzenie to podąża za standardowym podejściem znanym z formalizmu macierzy gęstości i zostaje przepisane na język symboli operatorowych, co autor sam przyznaje w podsumowaniu rozprawy.

Miałbym następujące uwagi:

1. (str. 28): Obiekty $\{q_S^k(x, p; \omega)\}_\omega$ są symbolami operatorów, a nie operatorami.
2. (str. 29): W równaniach (4.14) i (4.15) brakuje symbolu $\star$.
3. (str. 30): Oznaczenie $(+)$ w równaniu (4.29) nie zostało wcześniej wprowadzone.

Rozdział 4.2 przedstawia schemat rozszczepienia operatorowego służący do rozwiązywania równania Wignera–Lindblada wyprowadzonego w Sekcji 4.1. Zaproponowana metoda stanowi praktyczne narzędzie do analizy numerycznej otrzymanego równania ewolucji. Autor w umiejętny sposób wykorzystuje relacje komutacyjne do uzyskania wykładnika części dyssypacyjnej dynamiki (dryf i dyfuzja).

Miałbym następujące zasadnicze uwagi:

1. Wzór (4.48) nie jest ogólnie prawdziwy. Założenie o liniowej relacji komutacyjnej pomiędzy operatorami $\hat{X}$ i $\hat{Y}$ powinno zostać wyraźnie zaznaczone przed jego użyciem, a także należałoby wykazać, że operatory $\hat{G}$ i $\hat{\Pi}$ spełniają to założenie — co jest bezpośrednią konsekwencją Tabeli 4.1.
2. Warto byłoby pokazać, w jaki sposób przybliżone wzory przechodzą w rozwiązania ścisłe (przedstawione w Dodatku B) w przypadku potencjałów kwadratowych.

oraz drobniejsze:

1. (str. 34): Brak konsekwencji w oznaczeniu operatora jednostkowego w równaniach (4.48) i (4.49).
2. (str. 44): Niespójne oznaczenia operatorów adjungowanych w równaniu (4.54).
3. (str. 37): Operator $\hat{T}$ powinien być nazywany operatorem energii kinetycznej, a nie operatorem kinetycznym.

Mimo ogólnego tytułu, Rozdział 4.3 koncentruje się na wybranych wynikach dotyczących zaproponowanej definicji czasu oddziaływania, wyrażonej poprzez zmiany wybranych miar funkcji Wignera układu. Dyskusja opiera się na obserwacji, że o ile dowolny klasyczny hamiltonian generuje grupę symplektyzomorfizmów, o tyle kwantowe równanie Moyala generuje taką grupę jedynie w przypadku ewolucji swobodnej, odpowiadającej transformacjom ścinającym w przestrzeni fazowej.

Miałbym następującą uwagę:

1. Wynik (4.81) dla właściwych funkcji gęstości prawdopodobieństwa jest znany [1], stąd powinien on również obowiązywać dla wartości bezwzględnej ogólnej funkcji Wignera. Autor powinien wyjaśnić, na czym polega oryginalność tego wyniku.

Rozdział 4.4 poświęcony jest analizie dynamiki układu kwantowego uśrednionej po realizacjach losowych zaburzeń. Rozdział rozważa wpływ stochastycznych fluktuacji potencjału na przestrzenno-fazową ewolucję układu oraz omawia otrzymaną dynamikę uśrednioną.

W przybliżeniu pierwszego rzędu pokazano, że uśrednianie po losowych zaburzeniach prowadzi do efektywnej modyfikacji równania Wignera–Lindblada. W szczególności wariancja fluktuującego potencjału generuje dodatkowy wkład dyssypacyjny typu Lindblada, który modyfikuje przestrzenno-fazową ewolucję funkcji rozkładu Wignera.

Rozdział ten wyjaśnia zależność pomiędzy ścisłą średnią po zespole pojedynczych realizacji a efektywną dynamiką uśrednioną generowaną przez zmodyfikowane równanie master. Analiza ta stanowi teoretyczną podstawę interpretacji ewolucji uśrednionej jako przybliżonego opisu układu poddanego klasycznej losowości i przygotowuje grunt pod badania numeryczne przedstawione w kolejnych rozdziałach.

Miałbym następującą zasadniczą uwagę:

1. Pokazano, w jaki sposób możliwe jest modyfikowanie współczynnika D_{xx} za pomocą losowego potencjału. Powstaje pytanie, czy istnieje analogiczny sposób (bądź twierdzenie typu no-go) losowej modyfikacji hamiltonianu prowadzącej do zmiany parametrów Γ , D_{pp} oraz D_{xp} .

Ponadto uśredniane nie są najbardziej ogólne lindbladiany — odchylenia mają charakter wyłącznie dyssypacyjny, w związku z czym wszystkie lindbladiany w zespole mają tę samą część hamiltonowską. Wyjście poza założenie (4.91) umożliwiłoby modyfikację innych parametrów lindbladianu. Szczególnie interesujące byłoby pokazanie, jaki rodzaj dyssypacji mógłby zostać wygenerowany przez losową rodzinę czysto hamiltonowskich lindbladianów (generatorów ewolucji unitarnych).

oraz drobniejszą:

1. (str. 42): W równaniu (4.89) uśredniony lindbladian powinien działać na $\rho_0(x, p)$.

Rozdział 4.5 ilustruje wcześniej wprowadzone koncepcje za pomocą symulacji numerycznych. Przedstawione zostają trajektorie fazowo-przestrzenne funkcji Wignera, zdefiniowane jako ewolucja wartości średnich położenia i pędu. Zespoły rozwiązań odpowiadające rodzinom losowo zaburzonych potencjałów, losowanych z rozkładów Gaussa i jednostajnego, prowadzą do zbiorów trajektorii (oznaczonych kolorem szarym). Są one porównywane z trajektorią odpowiadającą potencjałowi uśrednionemu (kolor czerwony) oraz z trajektorią dla potencjału niezaburzonego (kolor zielony). Dla każdej realizacji analizowana jest również ewolucja drugich momentów. Ponadto obliczane i prezentowane są wybrane funkcjonały funkcji Wignera, w tym parametr nieklasyczności oraz entropia Shannona. Podrozdział 4.5.2 omawia wyniki uzyskane dla pojedynczej bariery Gaussa z zaburzonym położeniem środka, natomiast Podrozdział 4.5.3 rozszerza analizę na łańcuch barier Gaussa

z niezależnie zaburzonymi położeniami środków. Wyniki tych badań numerycznych są omówione w Podrozdziale 4.5.4.

Miałbym następujące zasadnicze uwagi:

1. Równania (4.119) i (4.120) wymagają nieco bardziej szczegółowego wyprowadzenia. W Podrozdziale 4.5.2 pojawia się stwierdzenie: „both the averaged system and its approximation should be influenced by the effective environmental effects introduced through averaging, rather by a physical coupling to an external system” — nie wyjaśniono jednak, co dokładnie oznacza „uśrednione przybliżenie”. Nie jest jasne, czy odnosi się ono do pierwszego zagadnienia początkowego w (4.82), rozwiązanego przez (4.84), czy też do aproksymacji wykładniczej w metodzie rozszczepienia operatorowego. Przybliżenie to szybko odbiega od rozważanych trajektorii. Na rysunkach 4.6 i 4.19 entropia Shannona dla przybliżenia zaczyna maleć, podczas gdy dla trajektorii rośnie w momencie wejścia układu w obszar potencjału. Rysunek 4.22 pokazuje jeszcze gorsze zachowanie — odległość pomiędzy średnią zespołową a jej przybliżeniem gwałtownie rośnie od samego początku ewolucji.
2. Rysunki 4.6 i 4.19 ujawniają dodatkowo inne niepożądane zachowanie — entropia uśredniona jest mniejsza niż entropia każdej z realizacji w zespole, co pozostaje w sprzeczności z jej wklęsłością. Fakt ten nie został zauważony ani skomentowany, a jest bardzo istotny. Wydaje się, że ujemne obszary funkcji Wignera kompensują się, prowadząc do mniej zmieszanego rozkładu PDF niż rozkłady uśrednione, gdy obliczenia wykonywane są dla wartości bezwzględnej funkcji Wignera. Zastosowanie wartości bezwzględnej w definicji (z pominięciem kwantowości) niszczy własność wklęsłości, a nazywanie takiej funkcji entropią nie jest właściwe. Być może zdefiniowanie entropii Rényiego (w tym entropii Shannona) poprzez szeregi potęgowe, w których zwykle mnożenie zastąpione jest iloczynem Moyala, prowadziłoby do poprawnej definicji entropii (choć wzory analityczne mogłyby być bardzo złożone).
3. Komentarz pod równaniem (4.157) jest niepoprawny — nieujemność (a nawet ścisła ujemność) pochodnej funkcji, wraz z dolnym ograniczeniem tej funkcji, implikuje istnienie granicy, lecz nie determinuje jej wartości.

oraz drobniejszą:

1. (str. 75): Równanie (4.145) — dlaczego średnia z F jest równa średniej z jego pochodnej?

Dodatek A zawiera podstawowe definicje i wybrane fakty dotyczące przestrzeni Hilberta. Dodatek B przedstawia dokładne rozwiązania równania Wignera–Lindblada dla potencjałów kwadratowych. Dodatek C omawia zależność pomiędzy skalowaniami dziedzin dwóch zmiennych powiązanych transformatą Fouriera. Jest to fakt dość trywialny i słabo związany

z resztą pracy. Dodatek D porównuje ścisłą średnią po zespole z rozwiązaniem uzyskanym z dynamiki uśrednionej wprowadzonej w Sekcji 4.4. Dodatek E wyprowadza jawną analityczną postać operatora $\langle \Delta^2 \rangle$ pojawiającego się w równaniu Wignera–Lindblada dla dynamiki uśrednionej. Wreszcie Dodatek F zawiera dwie publikacje autorstwa doktoranta.

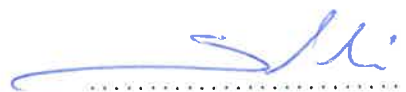
Miałbym następującą uwagę:

1. Funkcja $\Phi(\omega)$ w równaniu (B.9), kodująca warunek początkowy, wymaga dodatkowego opisanie. Z drugiej strony symetria pierwszego całkowanego wyrażenia jest trywialna przy zastosowaniu reguły transpozycji iloczynu (oraz ewentualnie rozwinięcia wykładnika w szereg), w związku z czym wszystkie wyjaśnienia następujące po równaniu (B.9) wydają się zbędne.

Wyniki prezentowane w pracy zostały opublikowane w pięciu artykułach naukowych w renomowanych czasopismach. Pracę cechuje spójność tematyczna i prawidłowy układ treści, prezentując oryginalne rozwiązanie problemu naukowego. Autor pokazuje w niej dużą biegłość w mechanice kwantowej i analizie funkcjonalnej oraz pokazuje umiejętność korzystania z niej do rozwiązywania zagadnień fizycznych. Autor wykazuje się również umiejętnością przeprowadzania eksperymentów numerycznych jak również krytycznej analizy metod numerycznych. Rozprawa napisana jest prawidłowym językiem angielskim, choć da się znaleźć pojedyncze niegramatyczne zdania (zapewne pozostawione przez przypadek), bardziej systematyczne są błędy dotyczące używania rodzajników. Kilkukrotnie słowo naïve zostało zapisane niepoprawnie jako naïve. Na szczególną uwagę zasługują artystyczne wizualizacje stanów czystych i mieszanych oraz dynamiki cząstek w sąsiedztwie bariery.

Wniosek końcowy

Podsumowując stwierdzam, że recenzowana rozprawa spełnia wymagania określone w art. 187 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (z późn.zm.) i wnioskuję o jej dopuszczenie do dalszych etapów postępowania o nadanie stopnia doktora w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne.



(podpis recenzenta)

Literatura

- [1] A. Rényi, On Measures of Entropy and Information, in *Proceedings of the Fourth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, Vol. 1, pp. 547–561, University of California Press, Berkeley (1961).

