



Politechnika Łódź
Instytut Fizyki

dr hab. inż. Jaromir Tosiek, prof. uczelni
e-mail: jaromir.tosiek@p.lodz.pl
tel. (+4842) 631 36 42
Instytut Fizyki Politechniki Łódzkiej

Recenzja rozprawy doktorskiej Dariusza Woźniaka
zatytułowanej **“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

8 stycznia 2026

1 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.

2 Charakterystyka i opis rozprawy

Rozprawa została przygotowana pod kierunkiem dr hab. inż. Bartłomieja Spisaka, prof. AGH na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie.

Praca doktorska została napisana w języku angielskim i ma objętość 139 stron. Na rozprawę składają się: podziękowania, streszczenia w językach angielskim oraz polskim, wstęp, cztery rozdziały zawierające rozważania teoretyczne oraz wyniki symulacji komputerowych, podsumowanie, pięć dodatków zawierających uzupełnienie teoretyczne oraz rachunki pomocnicze, dwa artykuły częściowo związane z tematyką pracy doktorskiej oraz obszerna bibliografia.

2.1 Wstęp teoretyczny

Dysertacja Dariusza Woźniaka dotyczy problemu opisu oddziaływania prostego układu kwantowego z otoczeniem rozumianym w sensie termodynamicznym tzn. strukturą o nieporównanie większej liczbie stopni swobody i energii niż badany układ. Oddziaływanie układu z otoczeniem nie prowadzi zatem do obserwowalnych zmian otoczenia.

Przy takim stopniu złożoności niemożliwe jest poznanie początkowej funkcji falowej zespołu składającego się w otoczenia i właściwego układu oraz operatora Hamiltona dla tegoż zespołu a następnie badanie ewolucji całości przy użyciu np. równania Schroedingera. Co więcej, nie ma takiej potrzeby, bo interesuje nas wyłącznie układ a otoczenie tylko narzuca na niego pewne więzy.

Dlatego w ujęciu mechaniki kwantowej modelowanej na pewnej przestrzeni Hilberta informację o stanie układu zawiera operator gęstości $\hat{\rho}_S$ a nie ket $|\Psi\rangle$ należący do przestrzeni Hilberta układu $\mathcal{H}_{\text{ukl.}}$. Operator $\hat{\rho}_S$ zawiera tę część informacji o otoczeniu, która jest niezbędna do badania naszego układu. Należy przy tym przypomnieć, iż zazwyczaj dla układu kwantowego opisywanego operatorem gęstości nie da się zbudować keta. Wyjątkiem są tzw. stany czyste, w których operator gęstości jest zarazem operatorem rzutowym.

O ile energia oddziaływania pomiędzy układem a otoczeniem jest dużo mniejsza od energii układu, ewolucja czasowa operatora gęstości w obrazie Schroedingera jest unitarna i w postaci różniczkowej wyraża ją wzór Liouville'a - von Neumanna

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_S = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H}_S, \hat{\rho}_S].$$

W sytuacji, kiedy oddziaływanie układ – otoczenie nie jest pomijalne, ewolucja czasowa operatora gęstości $\hat{\rho}_S$ w postaci różniczkowej opisywana jest, przy pewnych założeniach, równaniem Gorini – Kossakowskiego – Sudarshana – Lindblada (GKLS) - wzór (1.20).

W przypadku układów fizycznych mających odpowiednik klasyczny modelowany na

przestrzeni fazowej $\mathbb{R}^{2n}$, istnieje alternatywna do ujęcia Hilbertowskiego matematyczna reprezentacja takich układów. Punktem wyjścia jest w tym wypadku rozmaitość symplektyczna $\mathbb{R}^{2n}$. Obserwabłami są rzeczywiste funkcje gładkie na przestrzeni $\mathbb{R}^{2n}$, ale trzeba je mnożyć w łączny i w ogólności nieprzemienisty sposób przy użyciu tzw. iloczynu “*”

$$f(p_1, \dots, p_n, q^1, \dots, q^n) * g(p_1, \dots, p_n, q^1, \dots, q^n).$$

Stan jest reprezentowany przez rzeczywistą funkcję zwaną funkcją Wignera $W(p_1, \dots, p_n, q^1, \dots, q^n)$ określoną na przestrzeni fazowej a wartość oczekiwaną obserwabli $f(p_1, \dots, p_n, q^1, \dots, q^n)$ obliczamy jako

$$\int_{\mathbb{R}^{2n}} f(p_1, \dots, p_n, q^1, \dots, q^n) W(p_1, \dots, p_n, q^1, \dots, q^n) dp_1 \dots dp_n dq^1 \dots dq^n.$$

Mechanika fazowa na przestrzeni fazowej narodziła się w pierwszej połowie XX wieku, kiedy to ukazały się prace H. Weyla (H. Weyl, *Theory of Groups and Quantum Mechanics*, Methuen, London 1931), E. P. Wignera (E. P. Wigner, *On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium*, *Phys. Rev.* **40**, 749 (1932)), H. J. Groenewolda (H. J. Groenewold, *On the principles of elementary quantum mechanics*, *Physica* **12**, 405 (1946)) oraz J. E. Moyala (J. E. Moyal, *Quantum mechanics as a statistical theory*, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **45**, 99 (1949)). W latach siedemdziesiątych ubiegłego stulecia nowatorskie podejście do tego formalizmu oparte na szeregach formalnych zaproponowali F. Bayen i M. Flato ze współpracownikami (F. Bayen, M. Flato, C. Fronsdal, A. Lichnerowicz i D. Sternheimer, *Deformation theory and quantization*, *Ann. Phys.* **111**, 61 (1978)).

Przewaga fazowego ujęcia mechaniki kwantowej w porównaniu z tradycyjnym opisem w języku przestrzeni Hilberta szczególnie widoczna jest w aspekcie możliwości rachunkowych, jakie daje geometria różniczkowa. Dzięki temu można analizować układy kwantowe o klasycznie nietrywialnych przestrzeniach symplektycznych. Da się nawet, wykorzystując specjalne przestrzenie fazowe typu siatka, reprezentować czysto kwantowe wielkości typu spin.

Aby pozostać obiektywnym, należy też wspomnieć o minusach tego formalizmu. Główną wadę mechaniki kwantowej na przestrzeni fazowej upatruję w złożoności rachunków często wymagających stosowania teorii dystrybucji. Ponadto jeśli stosuje się wzory różniczkowe na iloczyn Moyala, trzeba pamiętać, iż są to rachunki na szeregach formalnych względem stałej Plancka $\hbar$.

Szczegółową analizą treści dysertacji zajmę się w kolejnych podrozdziałach, w szczególności w części poświęconej oryginalności rozpatrywanego problemu naukowego.

2.2 Czy rozprawa doktorska prezentuje ogólną wiedzę teoretyczną w dyscyplinie nauki fizyczne?

Zdecydowanie tak. Temat wymaga stosowania modeli matematycznych i metod znanych z fizyki teoretycznej. Mamy zatem do czynienia z układem kwantowym opisywanym przy

użyciu operatora gęstości a następnie, w sposób równoważny, przez funkcję Wignera na przestrzeni fazowej. Zespół układ + otoczenie jest typowym obiektem dyskutowanym w mechanice statystycznej. Na podkreślenie zasługują metody matematyczne stosowane przez Autora. Mamy oczywiście narzędzia statystyczne, ale również rozwiązywanie równań różniczkowych cząstkowych czy elementy teorii dystrybucji, w tym transformatę Fouriera i jej odwrotność. A przede wszystkim zaawansowany rachunek operatorów ze świadomością niuansów z nim związanych (patrz uwaga na stronie 23 o operatorze $\exp(\hat{K})$, gdy $\hat{K}$ jest nieograniczony).

Przy tym pragnę zauważyć, że mimo stosowania narzędzi kojarzonych głównie z fizyką matematyczną sam problem opisu i analizy ansamblu jednakowych prostych układów czy to izolowanych czy też oddziałujących z otoczeniem, ma spory potencjał praktyczny.

2.3 Czy rozprawa doktorska wykazuje umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej przez Doktoranta?

Nie wiem, jak wyglądał podział pracy pomiędzy Doktorantem a Promotorem i ewentualnie innymi badaczami. Spróbuję zatem wywnioskować, jak brzmi odpowiedź na postawione w tytule paragrafu pytanie, na podstawie pewnych przesłanek.

Przed wszystkim w serwisie Web of Science znalazłem aż pięć publikacji, których jednym z autorów jest Dariusz Woźniak, a które to artykuły ukazały się w bardzo dobrych międzynarodowych czasopismach: Physical Review A, New Journal of Physics, Scientific Reports i Journal of Physics A. Tematyka tych prac dowodzi, że Doktorant od kilku lat jest zaangażowany w badania naukowe w ramach formalizmu kwantowego na przestrzeni fazowej i jego wyniki są wysoko oceniane przez specjalistów. Co więcej, edytorzy tak dobrych żurnali dostrzegają potencjał tkwiący w zagadnieniach eksplorowanych przez p. Woźniaka.

O umiejętności samodzielnego prowadzenia badań świadczy też przemyślana struktura rozprawy. Na początku mamy prezentację zagadnienia w ramach standardowego formalizmu opartego o operator gęstości. Dalej pojawia się alternatywna wersja czyli mechanika kwantowa na przestrzeni fazowej. Po czym Autor gładko przechodzi do pierwszego z problemów rozwiązywanych w ramach dysertacji czyli kwestii uporządkowania operatorów Exp. Później mamy autorską wersję wyprowadzenia równania GKLS, propozycję uśrednionej dynamiki i wreszcie dwa rozbudowane przykłady. Jestem pod dużym wrażeniem wszechstronności analizy wygenerowanych wyników oraz ich szczegółowej analizy.

A wspomniane powyżej wyprowadzenie równania GKLS świadczy o potrzebie dogłębnego zrozumienia stosowanych narzędzi matematycznych, co też dowodzi umiejętności samodzielnego prowadzenia badań naukowych.

Na podkreślenie zasługuje szeroki wachlarz umiejętności badawczych. Doktorant dobrane czuje się wykonując rachunki ścisłe, ale także wyśmienicie radzi sobie wykorzystując

komputer i metody numeryczne. Potrafi również stosować metody przybliżone, bez których znaczna część obliczeń nie dałaby się wykonać.

Wreszcie rozbudowana bibliografia świadczy o orientacji w tematyce oraz umiejętności korzystania z dorobku innych.

2.4 Czy rozprawa stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego?

Zagadnienie badania dużego zbioru zbliżonych do siebie prostych układów kwantowych izolowanych bądź oddziałujących z otoczeniem to bez wątpienia istotny problem fizyczny. Oczywiście, pojedyncza cząstka swobodna bądź oscylator harmoniczny są pięknymi modelami. Gdy jednak zamierzamy badać ich ewolucję czasową w świecie rzeczywistym, natrafiamy na szereg problemów. Nie znamy przecież dokładnie warunków początkowych ani nie potrafimy całkowicie wyeliminować wpływu otoczenia. I uwzględnieniu tych czynników poświęcona jest praca doktorska Dariusza Woźniaka.

Po sformułowaniu zadania w języku operatora gęstości działającego w przestrzeni Hilberta i wprowadzeniu kluczowego dla całej pracy równania GKSL Dariusz Woźniak tłumaczy problem na język mechaniki kwantowej na przestrzeni fazowej korzystając z korespondencji Weyla. Nie znam motywacji Autora, ale zgaduję, że po porównaniu obydwu podejść uznał, iż rachunki na przestrzeni fazowej będą bardziej efektywne.

Natępnie rozwiązuje fundamentalny z punktu widzenia celu pracy problem obliczania wyrażeń typu

$$\exp(t(\hat{A} + \hat{B}))f(x)$$

dla niekomutujących operatorów $\hat{A}$ oraz $\hat{B}$.

Dalej mamy przejście do przykładów. Autor wprowadza zarówno standardowe narzędzia statystyczne w rodzaju średnia, wariancja jak i dedykowane funkcji Wignera typu parametr nieklasyczności, rodzina entropii Wignera-Renyi, czystość stanu czy echo Lochschmidta a także odległość między stanami. A przede wszystkim proponuje metodę analizy ansamblu przy użyciu średniego rozwiązania $\bar{\rho}$.

Dla przykładu potencjałów zaburzonych: Gaussowskiego (wzór 4.133) oraz łańcucha takich potencjałów (wzór 4.135) Doktorant przeprowadza analizę numeryczną ewolucji samych trajektorii fazowych oraz wymienionych powyżej parametrów dla układów bez zaburzenia, z zaburzeniem, uśrednionego oraz przybliżonego uśrednionego w wersjach izolowanej oraz otwartej.

Należy przy tym zaznaczyć, że układ izolowany również podlega opisowi statystycznemu, bowiem Autor analizuje zespół układów różniących się wartościami parametru λ występującego w potencjałach.

Właściwą część pracy kończy wyczerpująca dyskusja wyników oraz propozycja dalszych kierunków badań.

Jasno zatem widać, iż Autor w swojej rozprawie przedstawia oryginalne rozwiązanie problemu naukowego, na które to rozwiązanie składają się min. wskazane powyżej elementy.

2.5 Uwagi i pytania

Chciałbym też zwrócić uwagę na dwie publikacje dołączone do rozprawy i powiązany z nimi podrozdział 4.3, w których rozpatrywana jest arcyciekawa kwestia czasu w układach kwantowych. W Hilbertowskiej mechanice kwantowej obserwable są reprezentowane przez operatory samosprężone. Wyjątkiem jest czas, który pełni rolę parametru. Ale przecież eksperymentalnie potrafimy powiedzieć, co to jest np. czas przejścia cząstki przez barierę potencjału. We wspomnianych pracach zawarta jest propozycja odpowiedzi na pytanie, czym jest czas oddziaływania cząstki z barierą potencjału.

Złożenie i sformatowanie rozprawy to spore wyzwanie edytorskie. Nieuniknione w takiej sytuacji są pewne błędy. Wskazuję kilka z nich.

- str. 7 We wzorze (1.8) powinno występować a_k zamiast $|a_k|^2$. Nie ma powodu, by wartość oczekiwana dowolnego operatora samosprężonego była nieujemna.
- str. 10 Nazwisko jednego z autorów twierdzenia piszemy “Sudarshan”.
- str. 16 W Proposition 2.1 potrzebne jest założenie, iż $\frac{\partial f}{\partial \hbar} = \frac{\partial g}{\partial \hbar} = 0$.
- str. 18 Układ równań (2.19) w przypadku braku degeneracji jest spełniony wyłącznie przez funkcje typu ϱ_{nm} .
- str. 23 Zamiast “Eqn. (3.3)” powinno być “Eqn. (3.5)”
- str. 29 Brakuje objaśnienia symbolu $S_k(\omega)$ we wzorze (4.14)
- str. 48 Powinno być “receive” zamiast “recieve”.
- str. 49 Jest “postivie” a powinno być “positive”
- str. 63 Napisano “potentnial” zamiast “potential” oraz wcześniej powinno być μ .
- str. 91 W pierwszym zdaniu pojawia się symbol $V(x; \lambda) = Ex$ i nie zostaje podana relacja pomiędzy E a λ .

Chcę też zadać kilka pytań.

1. W rozdziale czwartym wszechstronnie analizowana jest ewolucja czasowa bardzo prostego układu o jednym stopniu swobody. W każdym przypadku dla zadanego

ansamblu startuje się z tego samego gaussowskiego stanu początkowego 4.115. Proszę o wyjaśnienie, jak w przypadku układu izolowanego fizycznie jest realizowana przypadkowość potencjału (zależność od λ) oraz jakie jest uzasadnienie kształtu operatora Lindblada (4.30)?

2. W jaki sposób na stronie 47 została obliczona średnia wartość energii stanu początkowego, skoro nie został jeszcze wybrany hamiltonian?
3. W paragrafie 4.5.3 zaraz po wzorze definiującym potencjał (4.135) znajdujemy informację, że wartość indeksu k jest ograniczona przez długość obszaru przyjętego do obliczeń.

Ile konkretnie wynosiła ta wartość (czy to 20, jak sugeruje tekst ze strony 47)? I co działo się z potencjałem na brzegach? Czy mamy tam do czynienia ze sztywnymi ścianami czy też po prostu przyjęto, że potencjał znika? To ostatnie pytanie nabiera dużego znaczenia w związku z wnioskiem ze strony 76 mówiącym o tym, iż w analizowanym przykładzie średnie położenie nie dąży do skończonej wartości.

4. W pracy kilkakrotnie występuje pojęcie granicy klasycznej. Jak Autor je rozumie, w szczególności w kontekście funkcji Wignera i faktu, że zależy ona od $1/\hbar$. Jak uzasadnić pojawiający się na początku strony 18 wzór

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0^+} \varrho(x, p, t) \rightarrow \delta(p) |\psi(x, t)|^2 \quad ?$$

Dalej, skąd pewność, że w rachunkach zawierających funkcje nie będące wielomianami w x oraz p wolno stosować różniczkowe wzory na iloczyn Moyala i nie trzeba sięgać po postać całkową będącą trzecią formułą we wzorze (2.8)?

I czy nie da się lepiej oszacować parametru δ we wzorze (4.123)? Przyjęcie, że parametr nieklasyczności może być dowolnie duży oznacza, iż nie ma ograniczeń na wartość całki z funkcji Wignera po obszarze, gdzie przyjmuje ona wartości ujemne.

5. Opis zachowania ansamblu przy użyciu średniego rozwiązania działa tylko dla krótkich czasów, co Autor wyraźnie zaznacza. Czy widzi Pan możliwość uogólnienia stosowania średniego rozwiązania na dowolne odcinki czasu?
6. Wreszcie pytania o rysunki. Dlaczego na niektórych (np. 4.19a, 4.19c, 4.25a, 4.25c) czerwona linia reprezentująca uśrednianie po ансамblu znajduje się z dala od szarego obszaru? Czy trajektorie składające się na szary obszar są próbką reprezentatywną? Czy trajektorie fazowe (np. 4.4a, 4.4.b) pokazują wartości średnie położenia i pędu?

3 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.

Jaromir Tosiak