

dr hab. Jarosław Kwapień, prof. IFJ PAN

Kraków, dn. 28 maja 2026 r.

Instytut Fizyki Jądrowej PAN
Zakład Teorii Systemów Złożonych
ul. Radzikowskiego 152, 31-342 Kraków

RECENZJA PRACY DOKTORSKIEJ

mgra inż. Macieja Kalki

pod tytułem

***Zastosowanie metod entropowych do badania dynamiki stanów
w "małych" układach kwantowych — ujęcie przestrzenno-fazowe***

przygotowanej pod kierunkiem

dra hab. inż. Bartłomieja J. Spisaka, prof. AGH

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 dn. 20 lipca 2018 r. "Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce" (z późn. zm.).

2. Charakterystyka i opis rozprawy.

W swojej rozprawie doktorskiej p. mgr inż. Maciej Kalka stosuje funkcję Wignera i opartą na niej entropię Wignera-Rényiego (dalej: entropię W-R) do opisu ewolucji wybranych układów kwantowych w przestrzeni fazowej. Rozprawa składa się ze Wstępu, trzech rozbudowanych rozdziałów tworzących jej trzon, krótkiego Podsumowania oraz kilkuczęściowego Dodatku. Zamyka ją rozbudowany spis literatury.

Wstęp zawiera ogólne wprowadzenie do tematyki rozprawy, sygnalizując główne zagadnienia, o których będzie szerzej mowa w kolejnych rozdziałach. Osobne podrozdziały zostały przeznaczone na zwięzłe wypunktowanie celów, jakie postawił sobie Autor, oraz opisanie struktury rozprawy.

Rozdział 2, zatytułowany *Dynamika kwantowa w przestrzeni fazowej* rozpoczyna się prezentacją podstawowych pojęć dotyczących ewolucji stanów w obrazie Schrödingera, formalizmu operatora gęstości i funkcji Wignera. Będąca w tym rozdziale elementem pobocznym, ale istotnym w dalszej części pracy, podana zostaje definicja parametru nieklasyczności Kenfacka-Życzkowskiego. Autor podaje jej wartości dla szczególnych przypadków stanów gaussowskich ($\delta=0$) i stanów nieklasycznych ($\delta>0$). Tu pojawia się problem, ponieważ pojęcie nieklasyczności stanu bywa różnie definiowane. Jak wynika z kontekstu (podrozdziały 1.1, 2.2.2 i 3.1.1), w rozprawie nieklasyczność została utożsamiona z ujemną wartością funkcji Wignera, co wszakże jest tylko jedną z możliwych definicji. W przypadku najczęściej spotykanej definicji opartej na reprezentacji Glaubera-Sudarshana, stany gaussowskie także mogą być nieklasyczne (np. stany ściśnięte), mimo że dla nich $\delta=0$. Z tego powodu przyjęta definicja nieklasyczności powinna być podana jawnie.

Z formalizmem funkcji Wignera nierozzerwanie związane jest równanie Moyala, dlatego w dalszej części rozdziału zostaje ono omówione wraz z metodologią rozwiązywania. Spośród wspomnianych w tekście różnych podejść do tego zagadnienia, Autor rozprawy wybrał metodę wykorzystującą algorytm spektralny split-operator oparty o szybką transformatę Fouriera w zdyskretyzowanej przestrzeni fazowej. Jako efektywne realizacje tego algorytmu przedstawione zostały symetryczne rozszczepienie Stranga II rzędu i zwiększające dokładność przybliżenia rozszczepienie China IV rzędu. Warto zauważyć, że Autor robi przegląd różnych możliwych alternatywnych metod numerycznego rozwiązywania równania Moyala, nie podaje jednak argumentu przemawiającego za wyborem tego konkretnego podejścia. Czy była to dokładność obliczeniowa, szybkość, względnie niski stopień złożoności kodu, a może coś innego?

Podrozdział 2.5 zawiera prezentację metodologii rozwiązywania równania Moyala w sytuacji, gdy potencjał w Hamiltonianie jest zależny od czasu, tak jak w przypadku zanurzenia układu w polu elektromagnetycznym lub w samouzgodnionym polu elektrycznym. Rozdział zamyka omówienie numerycznej metody rozwiązywania równania Moyala dla układu kwantowego, będącego odpowiednikiem klasycznego układu Własowa-Poissona. Można bez wątpliwości stwierdzić, że pomimo wyrażonych wyżej uwag rozdział 2 jest solidnym wprowadzeniem teoretycznym i zawiera kompendium wiedzy potrzebnej do zrozumienia metodologii badawczej stosowanej w kolejnych rozdziałach rozprawy.

W **Rozdziale 3**, zatytułowanym *Dynamiczna entropowa miara nieklasyczności*, Autor rozważa dynamikę stanów typu kota Schroedingera oddziałujących z barierą potencjału w opisie przestrzenno-fazowym. Rozdział zaczyna się od wprowadzenia definicji entropii W-R i podania jej fizycznej interpretacji dla kilku wybranych wartości wykładnika α . Tu warto zauważyć, że Autor stwierdza, że entropia W-R jest uogólnieniem klasycznej entropii Rényiego na przypadek kwantowych stanów w przestrzeni fazowej. To sformułowanie nie wydaje się jednak adekwatne. Obie definicje entropii mają wprawdzie podobieństwa, gdyż wykorzystują wyrażenie o podobnej konstrukcji, jednak w przypadku klasycznej entropii Rényiego mamy do czynienia z rozkładem prawdopodobieństwa znormalizowanym w L^1 , natomiast w przypadku entropii W-R mamy do czynienia z kwadratem modułu funkcji Wignera, co oznacza, że w granicy klasycznej też otrzymamy wielkość kwadratową znormalizowaną w L^2 . Stąd też bardziej właściwe byłoby sformułowanie, że entropia W-R jest kwantową, przestrzenno-fazową wersją klasycznej entropii Rényiego, a nie jej uogólnieniem.

Po podaniu definicji entropii W-R Autor przedstawia jej zastosowanie do identyfikacji topologicznych przejść fazowych w dwuwymiarowych materiałach Diraca, a dokładnie w silicenie. Materiał ten wykazuje przejścia pomiędzy fazą pasmową a fazą topologiczną, którymi można sterować poprzez przyłożone pole elektryczne. Ta część rozprawy zawiera już wyniki uzyskane osobiście przez Autora. Proponuje on zastąpienie dotychczas używanej definicji topologicznej liczby kwantowej $C(\Delta_z)$, która charakteryzuje topologiczne przejścia fazowe w materiałach 2D, opartej na entropii względnej Rényiego wyliczonej dla elektronów i dziur na danym poziomie Landaua, analogiczną definicją opartą o entropię W-R. Zmianę tę motywuje czułością entropii W-R na elementy pozadiagonalne macierzy gęstości, które są odpowiedzialne za korelacje między położeniem i pędem oraz efekty koherencji.

Autor pokazuje, że to zmodyfikowane podejście poprawnie identyfikuje wartości zmiennych, dla których zachodzą topologiczne przejścia fazowe w silicenie. W tym miejscu należy zaznaczyć, że otrzymany przez Autora wynik przemawiałby znacznie bardziej na korzyść użycia entropii W-R, gdyby został zestawiony z jego odpowiednikiem dla definicji opartej na entropii względnej. Brak takiego zestawienia nie pozwala stwierdzić, czy argumenty teoretyczne przemawiające za entropią W-R są istotne także w praktyce. Jest to

pewien mankament tej części rozprawy. Innym mankamentem przedstawionych rozważań jest zastosowanie metody tylko w przypadku jednego konkretnego materiału - silicenu. Pozostaje bowiem otwartą kwestia, czy ta metoda okazałaby się równie skuteczna w przypadku innych materiałów. Brakuje także próby dyskusji, dlaczego entropia dla wszystkich trzech wartości wykładnika α daje podobne wyniki mimo różnych interpretacji każdej z nich; Autor nie zastanawia się też, dla jakiego zakresu wartości wykładnika dokładność metody zacznie się psuć.

W kolejnej części rozdziału Autor przedstawia dowód twierdzenia o istnieniu dolnego ograniczenia wartości połówkowej entropii W-R, a dalej dowodzi równoważności tej entropii z parametrem nieklasyczności. Następnie pokazuje, że entropia W-R jest monotoniczna względem wykładnika α , a więc entropia połówkowa przyjmuje największą możliwą wartość w przedziale od $\frac{1}{2}$ do $+\infty$. Wszystkie te dowody są bez zarzutu. Podrozdział 3.1 zamyka omówienie nowatorskiej metody wyznaczania czasu interakcji polegającej na wykorzystaniu symplektycznej niezmienniczości entropii W-R dla ewolucji swobodnej jako wskaźnika początku i końca interakcji stanu z potencjałem rozpraszającym. Metoda ta jest jednym z najważniejszych zagadnień omówionych w rozprawie.

Pozostałe podrozdziały Rozdziału 3 poświęcone zostały badaniu dynamiki stanów typu kota Schrödingera rozpraszanych na gaussowskiej barierze potencjału o regulowanej wysokości i szerokości. Autor wyprowadził wyrażenie na funkcję Wignera dla tego przypadku, przyjmując konkretne wartości parametrów i charakterystyki siatki przestrzeni fazowej, a następnie przedstawił formuły dla konkretnej realizacji rozszczepienia Stranga II rzędu. Zadając wartości parametrów, Autor nie wyjaśnił niestety przyjętej wartości pędu $p_0=0.15$ jedn.at., która staje się zrozumiała dopiero pod koniec kolejnego podrozdziału lub po sięgnięciu przez czytelnika do jednej z oryginalnych publikacji [71] lub [94].

Omówienie wyników symulacji numerycznych zostało podzielone na cztery części: (1) dynamika funkcji Wignera, (2) ewolucja gęstości prawdopodobieństwa oraz dynamika entropii połówkowej jako wskaźnika nieklasyczności w zależności od (3) fazy względnej stanu, a także od (4) wysokości i szerokości bariery potencjału. Wynik, któremu Autor poświęcił najwięcej uwagi, jest asymetryzacja stanu Yurkego-Stolera z początkową fazą względną $\theta=\pi/2$. Niestety, brakuje próby odpowiedzi na pytanie o przyczynę tego zjawiska i jego interpretację.

W podrozdziałach 3.4.3 i 3.4.4 badane jest zachowanie entropii połówkowej W-R i parametru nieklasyczności Kenfacka-Życzkowskiego w zależności od fazy względnej między pakietami falowymi oraz wysokości i szerokości bariery potencjału. Na rysunkach 3.8, 3.9 i 3.10 Autor zaprezentował wyniki numeryczne dla obu tych wielkości fizycznych. To, co rzuca się w oczy na każdym z nich, jest fakt, że wielkości te dają dokładnie tę samą informację - co jest z jednej strony oczywiste, biorąc pod uwagę udowodnioną wcześniej przez Autora ich równoważność - ale z drugiej strony, o ile wartość numeryczna parametru nieklasyczności jest natychmiastowo interpretowalna z uwagi na jej odniesienie do 0, o tyle wartość entropii połówkowej wymaga najpierw wyliczenia jej wartości bazowej, zadanej przez $\ln(2\pi\hbar)$. Nasuwa się w tym kontekście obserwacja, że Autor w żadnym miejscu swojej rozprawy nie podał argumentów przemawiających na korzyść stosowania entropii połówkowej W-R względem parametru nieklasyczności.

Ostatnim z zasadniczych rozdziałów rozprawy jest **Rozdział 4 Tunelowanie protonu w DNA pod wpływem pola elektromagnetycznego**. Przedstawia on numeryczne rozwiązywanie równania Moyala w przestrzeni fazowej dla procesu tunelowania protonu w parze zasad A-T pod wpływem przyłożonego zewnętrznego pola elektromagnetycznego w zakresie podczerwieni, w wyniku którego powstają tautomeryczne formy tych zasad. Model teoretyczny układu został opisany w podrozdziale 4.1, a metodologia obliczeń w podrozdziale 4.2. Tu pojawia się pewna niejasność: Autor napisał, że w obliczeniach

wykorzystuje rozszczepienie Stranga II rzędu, podczas gdy w Dodatku A.4.6 jest także mowa o zrealizowanym numerycznie wariacie z rozszczepieniem China IV rzędu. Której wersji dotyczą więc wyniki przedstawione w kolejnych podrozdziałach?

W podrozdziale 4.3, omawiającym uproszczoną wersję układu bez zewnętrznego pola, Autor skupił się na prezentacji widma mocy zdefiniowanego wcześniej dynamicznego współczynnika tunelowania, które zawiera zarówno maksima dla składowej stacjonarnej, jak i częstości przejść pomiędzy stanami powyżej bariery potencjału. Z kolei w wersji pełnej z oscylującym polem elektromagnetycznym badanej w podrozdziale 4.4, Autor wprowadził formalizm modów Floqueta, aby wyjaśnić zmiany w strukturze widma mocy i pojawienie się nowych jego maksimów.

Widma mocy dla wybranych wartości pola przedstawione zostały na rys. 4.4. Rysunek ten zyskałby na czytelności, gdyby częstości, dla których pojawiają się najważniejsze maksima w przypadku braku pola i z polem, zostały zaznaczone pionowymi liniami. Bez tego maksima te są zbyt niskie, aby szybko ocenić zmiany w ich położeniach ze wzrostem amplitudy pola. Z kolei rysunek 4.5 prezentuje zależność entropii półwkowej $W-R$ od czasu. Autor nie podjął tu jednak próby wyjaśnienia widocznych zmian tej wielkości, która po początkowym wzroście do ok. 2.3, od pewnego momentu zaczyna spadać aż do wartości ok. 2.1, wskazując, że poziom nieklasyczności stanu maleje z czasem.

Analizę zależności współczynnika tunelowania i entropii półwkowej od częstości promieniowania elektromagnetycznego zawiera podrozdział 4.4.3. Autor zidentyfikował częstotliwość rezonansową równą ok. 15 THz, przy której obie wielkości osiągają wartości maksymalne, czyli zmiana formy zasad A i T następuje z największym prawdopodobieństwem. W ślad za tym wynikiem Autor zasugerował, że fakt występowania takiego zjawiska może umożliwić kontrolę nad tautomerizacją tych zasad, a jednocześnie pomóc zrozumieć zagrożenie, jakie dla tkanek żywych może stanowić promieniowanie o takiej częstotliwości. Jest to bardzo ciekawy wynik, biorąc pod uwagę, że zakres temperatur, przy którym promieniowanie podczerwone zawiera silne składowe o takiej częstotliwości, obejmuje temperatury spotykane także w codziennym życiu. O ile zewnętrzne źródła promieniowania nie powinny być w tym kontekście istotne, gdyż nie wnika ono głęboko w skórę, o tyle ciało istot stałocieplnych emituje je w całej swej objętości. Dlatego problem jego wpływu na pojawianie się błędów w replikacji DNA jest zagadnieniem wartym dalszych badań.

Odnosząc się łącznie do analiz przedstawionych w rozdziałach 3 i 4, w naturalny sposób nasuwa się spostrzeżenie, że Autor nie zajął się w ogóle kwestią dokładności numerycznej uzyskanych wyników z punktu widzenia kolejnych rzędów przybliżeń rozwiązań równania Moyala. Autor przedstawił metody rozwiązań w II i IV rzędzie, ale nie podał, czy gdziekolwiek zastosował to drugie z nich oraz nie podał, jak różnią się wyniki w tych dwóch przybliżeniach i czy ich błędy są porównywalne z błędami pochodzącymi z innych źródeł, np. gęstości siatki, periodyczności warunków brzegowych w FFT czy propagacji błędu w czasie. Pominięcie tego aspektu należy uznać za mankament dyskusji wyników.

Podstawową część rozprawy kończy **Podsumowanie**, gdzie Autor w skondensowanej formie wymienia to, co zostało omówione we wcześniejszych rozdziałach, wskazuje na najważniejsze wyniki oraz wymienia potencjalne kierunki dalszych badań. W szczególności interesujące wydaje się wskazane przez Autora przyszłe zastosowanie metodologii z rozdziału 4 do zbadania zjawiska tunelowania także pomiędzy guaniną i cytozyną a ich tautomerami. Rozprawę kończą: **Dodatek**, w którym Autor zamieścił prezentację niektórych pojęć z zakresu mechaniki statystycznej, podał wyprowadzenie równania Moyala oraz zamieścił szczegółowe opisy architektury procedur numerycznych wykorzystanych do obliczeń wraz z ich pseudokodami, i obszerna **Bibliografia** zawierająca 142 pozycje.

Na płaszczyźnie edytorskiej tekst rozprawy zawiera niewiele uchybień. Oto lista zauważonych w trakcie lektury drobnych błędów:

1. Na str. 22 w podrozdz. 2.5.4 wystąpiła literówka w słowie "potencjalna".
2. Na str. 23 w równaniu (2.91), w pierwszej linii tekstu na str. 24 oraz w równaniach (2.94) i (2.96) pojawia się operator kinetyczny $\hat{T}$, którego symbol koliduje z operatorem porządkowania czasowego w równaniu (2.75).
3. Na str. 31 w równaniu (3.4) w funkcji logarytmu pominięty został znak modułu przy kwadracie funkcji Wignera, co oczywiście nie jest matematycznie błędne, gdyż funkcja ta jest rzeczywista, ale nie jest to spójne z resztą wzorów.
4. Na str. 35 ostatnie zdanie w podrozdz. 3.1.4 zawiera powtórzenie informacji podanych wcześniej.
5. Na str. 36 w ostatnim zdaniu podrozdz. 3.1.5 brakuje dwukropka po słowie "praktyczne".
6. Na str. 42 w 2. linii od góry powinno być: (2.23) oraz (2.24).
7. Na str. 62 w 8. linii podrozdz. 4.4.4 brakuje słowa "promieniowania".

3. Wnioski końcowe.

Rozprawa p. mgr Macieja Kalki zawiera kilka oryginalnych rozwiązań problemów naukowych, które wnoszą niepomijalny wkład do teorii układów kwantowych w ujęciu przestrzenno-fazowym. Za najważniejsze z nich na poziomie teoretycznym można uznać ściśle wykazanie, że entropia W-R dla wykładnika $\alpha=1/2$ niesie tę samą informację o nieklasyczności układu, co parametr Kenfacka-Życzkowskiego, jej wartość stanowi górne ograniczenie dla entropii W-R wyższych rzędów, a także zaproponowanie metody identyfikacji topologicznych przejść fazowych w materiałach Diraca opartej na własnościach tej entropii. Na poziomie analiz numerycznych najistotniejsze wyniki to pokazanie, że faza względna superpozycji pakietów falowych w stanie początkowym oraz parametry bariery potencjału pozwalają na kontrolę stopnia nieklasyczności stanów w procesie rozpraszania oraz odkrycie zjawiska rezonansu w procesie tunelowania protonów w zasadach DNA związane z oscylującym polem elektromagnetycznym o częstościach w zakresie dalekiej podczerwieni, które może wzmacniać proces tautomeryzacji tych zasad. Są to ważne i ciekawe wyniki, które świadczą o ogólnej wiedzy teoretycznej w dziedzinie fizyki, dobrym zrozumieniu fundamentów teorii kwantów, swobodnym posługiwaniu się formalizmem Wignera-Moyal'a na poziomie analitycznym i numerycznym, a także uzyskanej dojrzałości i samodzielności naukowej w zakresie wyboru metod badawczych i wyciągania wniosków.

Uwagi krytyczne zawarte w recenzji nie obniżają wartości naukowej rozprawy, którą oceniam wysoko. Należy podkreślić, że została ona napisana w sposób merytoryczny, posiada adekwatną, przejrzystą strukturę, a dobór i liczba cytowanych prac świadczą o bardzo dobrej orientacji Autora w literaturze przedmiotu

Rozprawa została w znacznej części oparta na wynikach zamieszczonych w 4 pracach opublikowanych w czasopismach *Scientific Reports*, *Physical Review A* i *Entropy* (z 5 wymienionych prac Autora w dziedzinie fizyki). Każde z tych czasopism cieszy się dobrą opinią w zakresie objętym tematyką rozprawy. W dwóch z tych publikacji p. Kalka jest pierwszym autorem, co świadczy o jego dominującym wkładzie w te publikacje. Oprócz tego w informacjach o sobie p. Kalka przytacza listę kilku innych publikacji, już poza tematyką rozprawy, które potwierdzają, że jego zainteresowania badawcze wykraczają poza wąską specjalność mechaniki kwantowej i obejmują także kryptografię i energetykę, co dobrze rokuje pod kątem dalszej jego kariery naukowej. Dorobek publikacyjny Autora należy ocenić

pozytywnie, gdyż jego publikacje posiadają już ponad 30 cytowań w bazie Web of Knowledge i ponad 70 w bazie Google Scholar - wynik, który jest poza zasięgiem wielu doktorantów. Świadczy to, że wkład naukowy p. Kalki został już zauważony przez środowisko.

Podsumowując stwierdzam, że recenzowana rozprawa doktorska spełnia wymagania określone w art. 187 ustawy z dn. 20 lipca 2018 r. *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* i wnioskuję o dopuszczenie mgra inż. Macieja Kalki do dalszych etapów postępowania o nadanie stopnia doktora w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne.


dr hab. Jarosław Kwapien, prof. IFJ PAN