

Prof. dr hab. Tadeusz Domański
Katedra Fizyki Teoretycznej
Instytut Fizyki
Uniwersytet M. Curie-Skłodowskiej
20-031 Lublin

Lublin, 14 stycznia 2022 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Anny Francuz pt.
„Determining topological order with tensor network”

Przedłożona rozprawa doktorska podejmuje ważne zagadnienie opisu nielandauowskich właściwości faz materii, ze szczególnym uwzględnieniem porządku topologicznego. W tym celu wykorzystano numeryczne procedury obliczeniowe oparte na sieciach tensorowych, które umożliwiają ilościowe oszacowanie dalekozasięgowego splątania rozpatrywanych układów fizycznych w granicy termodynamicznej. Problematyka topologiczności jak też metodologia sieci tensorowych są aktualnie w centrum zainteresowań wielu grup badawczych, dlatego przeprowadzona analiza może mieć istotne znaczenie na rozwój dyscypliny.

Praca doktorska została przygotowana w Zakładzie Kwantowej Teorii Wielu Ciał w Instytucie Fizyki Teoretycznej Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie. Promotorem rozprawy jest prof. dr hab. Jacek Dziarmaga. Na zasadniczą treść rozprawy składa się cykl spójnych tematycznie trzech publikacji: Phys. Rev. B **101**, 041108(R) (2020); Phys. Rev. B **102**, 235112 (2020); Phys. Rev. B **104**, 195152 (2021). Doktorantka dołączyła także przewodnik, w którym zarysowała istotę zagadnienia topologicznego uporządkowania oraz przedstawiła obszerny opis metod opartych na sieciach tensorowych. Poniżej ocenię wartość merytoryczną wyników przedłożonej rozprawy.

Część wstępna pracy doktorskiej (opisana na stronach 1-37) nakreśla podstawowe problemy, dotyczące uporządkowania topologicznego oraz przedstawia metody przydatne do analizy realnych układów fizycznych. W rozdziale drugim Doktorantka przedstawiła kryteria klasyfikowania faz topologicznych, ze zwróceniem uwagi na klasy uniwersalności. Nawiązując do statystyki cząstek układów dwuwymiarowych wskazano, że opis frakcjonalnego (anyonowego) charakteru można uwzględnić przy pomocy macierzy topologicznych S oraz T , które tworzą grupę modularną $SL(2, Z)$. Scharakteryzowano właściwości takiej grupy i wyjaśniono, że macierze S i T oraz chiralny ładunek c w literaturze specjalistycznej służą do determinacji porządku topologicznego. Znane są jednak wyjątki, tzn. topologicznie różne fazy o identycznym zestawie (S, T, c) . Tym nie mniej, takie podejście dostar-

cza informacji o uporządkowaniu topologicznym. Macierze S i T można ściśle powiązać z właściwościami stanu podstawowego. Kitaev i Perskill wykazali, że fazy uporządkowania topologicznego charakteryzują się uniwersalną korektą do entropii splątania. Taka korekta (zwana entropią topologicznego splątania) jest niezerowa tylko w stanach uporządkowania topologicznego i może być wykorzystana do wyznaczenia stanów minimalnie splątanych. Omówiono rolę macierzy S (a także kombinacji macierzy S i T), wpływającej na zmianę bazy stanów minimalnie splątanych w różnych kierunkach. Takie podejście było wykorzystane w dwu publikacjach Doktorantki do wyznaczenia porządku topologicznego w układach anyonowych typu abelowego i nieabelowego.

Alternatywna metoda rozpoznawania porządku topologicznego bazuje na podejściu grupy renormalizacyjnej, z wykorzystaniem punktów stałych (*fixed points*). Doktorantka zilustrowała podejście w kontekście modeli strunowych (*string-nets*), ze zwróceniem uwagi na procesy scalania anyonów. W oparciu o wyodrębnione kategorie takiego scalania można w jednoznaczny matematycznie sposób zidentyfikować uporządkowanie topologiczne, w analogii do landauowskiej klasyfikacji konwekcyjnych przejść fazowych. Jedną z publikacji stanowiących rozprawę doktorską oparta jest na tego rodzaju kryterium, wykorzystując formalizm sieci tensorowych.

W trzecim rozdziale części wprowadzającej Doktorantka przedstawiła zalety metod obliczeniowych opartych na sieciach tensorowych. Jest to podejście o charakterze wariacyjnym, które umożliwia wiarygodne oszacowanie stanu podstawowego wielociałowych układów fermionowych w granicy termodynamicznej. Procedura pozwala na precyzyjne uwzględnienie efektów korelacyjnych oraz splątania kwantowego. Doktorantka klarownie opisała schemat optymalizacji podejścia wariacyjnego poprzez elementy tworzące sieć tensorową, począwszy od wyrazu skalarne do odpowiednio wyższych rzędów. Wiarygodne określenie stanów wielociałowych układów fizycznych można uzyskać stosując sieci tensorowe typu *Matrix Product States* (MPS) lub *Projected Entangled Pair States* (PEPS), których przykład dla 2-wymiarowej sieci kwadratowej zilustrowano na rysunku 3.2. Sieci tensorowe można stosować zarówno do układów o skończonych rozmiarach (o dowolnych warunkach brzegowych) jak też w granicy termodynamicznej. Przy użyciu sieci tensorowych można również reprezentować operatory (rysunek 3.3). W dalszej części Doktorantka skupiła uwagę na transalcyjnie niezmienniczych sieciach tensorowych, przedstawiła metodę wyznaczania wartości oczekiwanych obserwabli fizycznych przy pomocy macierzy transferu, a następnie omówiła wybrane algorytmy kontrakcji i optymalizacji.

Kolejny fragment *przewodnika* opisuje znaczenie kwantowego splątania jako sposobu detekcji uporządkowania, w szczególności topologicznego. W tym celu Doktorantka wprowadziła pojęcie entropii splątania, której skalowanie jest przydatne w badaniach zjawisk krytycznych oraz determinacji topologicznie trywialnych lub nietrywialnych kwantowych stanów wielociałowych. W układach jednowymiarowych z krótkozasięgowymi oddziaływaniami zachodzi współmierność entropii splątania z powierzchnią brzegową (*area law*),

co pozwala na jej wiarygodne wyznaczanie przy użyciu sieci tensorowych. W układach 2-wymiarowych warunek taki jest spełniony tylko w niektórych przypadkach, między innymi w stanach topologicznego uporządkowania (które są mniej splątane od trywialnych). Sieci tensorowe są wówczas idealnym narzędziem, gdyż zarówno MPS jak PEPS spełniają warunek skalowania brzegowego. Tym samym w naturalny sposób spełniona jest tzw. *bulk-boundary correspondence*. Doktorantka poruszyła również kwestię wpływu transformacji cechowania oraz symetrii w ujęciu sieci tensorowych. W podrozdziale 3.5 przedstawiono przykłady porządku topologicznego wykrytego przy użyciu sieci tensorowych, m.in. dla sieciowych modeli Heisenberga oraz Kitaeva. Autorka dokonała przeglądu kwantowych cieczy spinowych, wskazując empiryczne przesłanki występowania topologicznego porządku w rzeczywistych układach fizycznych.

Oryginalne wyniki przedłożonej rozprawy doktorskiej są przedstawione w trzech opublikowanych artykułach, w których Doktorantka jest pierwszym autorem (co przypuszczalnie świadczy o Jej wiodącym wkładzie). Postaram się wymienić ważniejsze aspekty problematyki analizowanej za pomocą sieci tensorowych w tych pracach.

[1] *Determining topological order from infinite projected entangled pair states*

A. Francuz, J. Dziarmaga, G. Vidal, L. Cincio, Phys. Rev. B **101**, 041108(R) (2020).

W pracy zademonstrowano sposób określania porządku topologicznego na przykładzie dwuwymiarowych modeli sieciowych. Idea polegała na użyciu metody wariacyjnej do minimalizacji energii stanu podstawowego. Obliczenia przeprowadzono dla nieskończenie długiego torusa, co umożliwia precyzyjne wyznaczenie topologicznego porządku nawet dla przypadku dużej długości korelacji. Macierze S i T wyznaczono na podstawie stopnia przekrycia między zdegenerowanymi stanami podstawowymi. Konkretnie warianty takich stanów wyznaczono dla sieci typu plastrów miodu (*honeycomb lattice*) dla trzech różnych torusów (przedstawionych na rysunku 4) o ustalonym strumieniu anyonowym. Analizę stanu podstawowego przeprowadzono dla modelu strunowego oraz w scenariuszu Kitaeva. W pierwszym przypadku do wyjścia poza punkt stały o zerowej długości korelacji wprowadzono zaburzenie $e^{\lambda V}$ z wyrazem oddziaływania $V = -\sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^x \sigma_j^x$. Metoda pozwoliła uzyskać bardzo dokładne wyniki w pobliżu punktu krytycznego, rozgraniczającego fazę ferromagnetyczną (co zilustrowano na rysunku 5). Analogiczna procedura wariacyjnej optymalizacji dla modelu Kitaeva $\mathcal{H} = -\sum_{\alpha} J_{\alpha} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^{\alpha} \sigma_j^{\alpha}$ na sieci o geometrii plastrów miodu pozwoliła dość dokładnie wyznaczyć topologiczne macierze S i T , z błędem na poziomie poniżej 4%. Taki stopień dokładności w zupełności wystarcza do jednoznacznego określenia porządku topologicznego. Procedura oparta na sieciach tensorowych z użyciem algorytmu *infinite Projected Entangled States* (iPEPS) jest więc faktycznie skutecznym narzędziem do identyfikacji porządku topologicznego dwuwymiarowych modeli sieciowych w granicy termodynamicznej. Takie podejście nie wymaga znajomości symetrii topologicznych i wydaje się być efektywne w odniesieniu do dowolnych modeli mikroskopowych.

- [2] *Determining non-Abelian topological order from infinite projected entangled pair states*
A. Francuz, J. Dziarmaga, Phys. Rev. B **102**, 235112 (2020).

Scenariusz numerycznego wyznaczania porządku topologicznego sformułowany w pracy [1] został w tym artykule uogólniony na przypadek nieabelowy. Do tego celu wykorzystano sieć tensorową typu PEPS konfiguracji stanu podstawowego z dobrze określonym strumieniem anyonowym. Wyznaczając macierze topologiczne S i T obliczono numerycznie stopień przekrycia między stanami podstawowymi, wyznaczając w rezultacie drugą entropię splątania Renyi'ego w granicy nieskończenie szerokiego cylindra. Autorzy zastosowali powyższy algorytm do ferromagnetycznego modelu Kitaeva w słabym polu magnetycznym, gdzie realizuje się chiralny porządek topologiczny. Systematyczny opis procedury opisano w rozdziałach II-VIII oraz precyzyjnie podsumowano w ostatnim rozdziale.

- [3] *Variational methods for characterizing matrix product operator symmetries*
A. Francuz, L. Lootens, F. Verstraete, J. Dziarmaga,
Phys. Rev. B **104**, 195152 (2021).

W artykule zastosowano wariacyjne metody oparte na sieciach tensorowych do wyznaczenia reguł scalania (*fusion rules*) anyonów. Na tej podstawie dokonano identyfikacji porządku topologicznego poprzez odpowiednio wyodrębnione kategorie scalania w oparciu o transformacje cechowania pomiędzy iloczynami iMPO oraz ich rezultatem. Tensory X_{ab}^c takiej transformacji cechowania, tzw. zwieracze (*zipper*s), niosą informację o regułach scalania anyonów. Umożliwia to wyznaczenie symboli F , jednoznacznie determinując porządek topologiczny. Systematyczny opis takiej procedury opisano w rozdziałach II-IX oraz zilustrowano jej praktyczne zastosowanie m.in. na przykładach: podwójnych semionów, modelu Kitaeva, scenariuszy Fibonacciego oraz Isinga sieci strun i innych reprezentacji iPEPS dla tzw. *quantum double*. W rozdziale X podsumowano w zwięzły sposób podstawowe kroki zaproponowanego algorytmu. Autorzy podkreślili, że w odniesieniu do modelu Kitaeva procedura pozwoliła wyznaczyć macierze topologiczne S i T ze znacznie większą (o rząd wielkości) dokładnością niż w pracy [1] dzięki ograniczeniu kroków obliczeń numerycznych. Niewątpliwą zaletą procedury jest jednoznaczność określenia porządku topologicznego na podstawie znajomości symboli F , w odróżnieniu od wniosków wynikających ze znajomości macierzy S i T . Wskazano także dodatkowe możliwe perspektywy udoskonalania procedury, na przykład do analizy przejść fazowych (podczas których porządek topologiczny ulega jakościowym zmianom).

W podsumowaniu, mgr Anna Francuz sformułowała oryginalną i pożyteczną procedurę wyznaczania porządku topologicznego za pomocą sieci tensorowych. Doktorantka zademonstrowała efektywność takiego podejścia do abelowych i nieabelowych układów anyonowych. Przeprowadziła wnikliwą analizę właściwości topologicznych na przykładzie wybranych modeli sieciowych. Wskazała możliwość dalszego udoskonalania procedury, np. do analizy topologicznych przejść fazowych.

Nie mam żadnych zastrzeżeń do publikacji, które zrecenzowali eksperci problematyki porządku topologicznego oraz metod sieci tensorowych. Jeśli chodzi o część wprowadzającą (opisaną na stronach 1-37) zabrakło mi natomiast porównania porządku topologicznego diskutowanego w pracy doktorskiej do kryteriów wyodrębniania klas faz topologicznych stosowanych powszechnie w literaturze specjalistycznej. Mam na myśli 10 elementarnych faz topologicznych określonych na podstawie symetrii odwracania w czasie, cząstka-dziura oraz chiralnej (*ten-fold symmetry*) dla układów o różnej wymiarowości [A. Kitaev, AIP Conf. Proc. **1134**, 22 (2009); M.Z. Hasan & C.L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010); X.-L. Qi & S.-C. Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011); M. Sato & Y. Ando, Rep. Prog. Phys. **80**, 076501 (2017)]. Przepuszczalnie w układach badanych przez Doktorantkę kluczową rolę odgrywały korelacje, co zasadniczo komplikuje przyporządkowanie odpowiedniej klasy topologiczności. Mimo wszystko, warto byłoby dokonać próby konfrontacji porządku topologicznego wyznaczonego przez Doktorantkę w wybranych scenariuszach ze standardową klasyfikacją faz topologicznych. Podczas obrony pracy doktorskiej chciałbym też prosić Doktorantkę o komentarz, czy wyznaczony przy pomocy sieci tensorowych porządek topologiczny ma ewentualny związek z niezmiennikami (np. liczbą Cherna) charakteryzującymi topologicznie nietrywialne stany materii.

Poza artykułami stanowiącymi treść przedłożonej rozprawy doktorskiej Doktorantka jest również współautorką trzech innych artykułów opublikowanych w Physical Review B. Uczestniczyła w realizacji grantów Opus (2016/23/B/ST3/00830; 2019/35/B/ST3/01028) i Etiuda (2020/36/T/ST3/00451) ze środków Narodowego Centrum Nauki a także uzyskała prestiżowy Diamentowy Grant (DI2015 021345) finansowany przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego. Fakty te świadczą o bardzo istotnym znaczeniu zaawansowanych obliczeń na bazie sieci tensorowych realizowanych przez Doktorantkę pod kierunkiem profesora Jacka Dziarmagi.

Przedłożona rozprawa doktorska posiada cenną wartość, zwłaszcza pod względem metodologicznym. Oryginalny algorytm wyznaczania porządku topologicznego przy użyciu sieci tensorowych może być skutecznym narzędziem identyfikacji stanów topologicznych w różnych układach fizycznych. Praca spełnia wszystkie zwyczajowe i prawne wymagania określone w Ustawie *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* (Dz. U. z 2020 r. poz. 85 z późniejszymi zmianami) do nadania stopnia doktora w dyscyplinie *nauki fizyczne*. Na tej podstawie wnioskuję do Rady Dyscypliny Nauki Fizyczne Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie o dopuszczenie pani magister Anny Francuz do publicznej obrony i dalszych etapów Jej przewodu doktorskiego.