

Dr hab. Krzysztof Cichy, prof. UAM
Wydział Fizyki
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 2
61-614 Poznań

Poznań, 2 września 2022 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Adama Wyrzykowskiego

pt. Local spin description of fermions on a lattice

wykonanej w Instytucie Fizyki Teoretycznej Uniwersytetu Jagiellońskiego
pod kierunkiem prof. Jacka Wośka i dr. hab. Piotra Korcyla

Przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska mgr. Adama Wyrzykowskiego liczy 87 stron plus streszczenia w języku polskim i angielskim. Napisana jest w „tradycyjnej” formie w języku angielskim i składa się z wprowadzenia, 4 rozdziałów właściwych, podsumowania oraz 4 dodatków i bibliografii zawierającej 36 pozycji.

Na wstępie, warto zauważyć, że tematyka pracy umieszcza ją nieco poza głównym nurtem współczesnych badań fizyki teoretycznej. Nie powinno to brzmieć jak zarzut – wręcz przeciwnie, uważam, że warto podejmować niestandardowe problemy, których rozwiązania mogą doprowadzić do bardzo ciekawych przyszłych badań również w bardziej popularnych dziedzinach. Rozprawę mgr. Wyrzykowskiego zaliczam właśnie do tej kategorii. Na tym etapie, nie jest dla mnie do końca jasne na ile uzyskane rezultaty rzeczywiście mogą być szerzej wykorzystane. Nie ma to jednak znaczenia dla oceny pracy, która dotyczy nietrywialnego problemu, który zostaje przez Doktoranta szczegółowo przeanalizowany i rozwiązany, a dodatkowo rozwiązanie to jest przekonująco potwierdzone wynikami numerycznymi.

Poruszona tematyka należy do najbardziej klasycznych w fizyce teoretycznej i jej korzenie sięgają niemal stu lat wstecz, do pracy Jordana i Wignera (JW) z 1928 roku. W artykule tym wprowadzono ścisłą transformację między operatorami fermionowymi i spinowymi, która okazała się niezwykle użyteczna zarówno analitycznie, jak i numerycznie. Przykładowo, jest ona podstawą niemal wszystkich numerycznych badań jednowymiarowych układów fermionowych i fermionowo-bozonowych, takich jak w podejściu sieci tensorowych. Możliwość zapisania Hamiltonianu w zmiennych spinowych jest niezwykle

wygodna i nie istnieją ograniczenia na typ analizowanego układu, np. bez problemu daje się analizować układy z polami cechowania, w których prawo Gaussa zapisane w zmiennych fermionowych przekłada się na dalekozasięgowe oddziaływania spin-spin. Warto jednak wspomnieć, że sieci tensorowe występują również w wariacie Grassmannowskim – transformacja JW nie jest więc absolutnie niezbędna. Jej walor praktyczny jest jednak niezaprzeczalny i z pewnością przyspieszył ogólny postęp badań nad tego typu układami.

Naturalnym pytaniem jest czy zalety transformacji JW można łatwo przenieść na wyższą liczbę wymiarów. Odpowiedź na to pytanie jest jednoznacznie przecząca, co Doktorant ładnie objaśnia we wprowadzeniu. Próby takiego uogólnienia podejmowano już krótko po publikacji JW i dość szybko dochodzono do wniosku, że zagadnienie nie jest łatwe. Tematyka uogólnienia transformacji ze zmiennych fermionowych do spinowych jest więc trudna i zasadnicze pytanie, na które próbuje odpowiedzieć Doktorant, brzmi: czy istnieje praktycznie użyteczne uogólnienie transformacji JW, oferujące narzędzie analizy układów dwu- i wyżejwymiarowych. W swej rozprawie, Autor argumentuje, że takie uogólnienie istnieje i konstruuje je *explicite* oraz pokazuje, że podejście to rzeczywiście działa na przykładzie prostego układu. Następnym krokiem, wykraczającym już poza zakres tego doktoratu, jest próba zastosowania tej metody do bardziej realistycznego układu fizycznego.

Przejdę teraz do omówienia zawartości rozprawy.

Wprowadzający rozdział 1 jest dość obszerny. Autor przypomina transformację JW i wyjaśnia powody porażki naiwnych prób jej uogólnienia. Następnie, przechodzi do idei Wośka i Szczerby z lat 80. XX wieku, na której rozwinięciu oparta jest rozprawa. Kolejny podrozdział poświęcony jest szczegółowej dyskusji motywacji pracy, widzianej przez Doktoranta z trzech perspektyw. Warto je tutaj przywołać, gdyż ostateczny sukces podejścia będzie w przyszłości zależał od tego, czy może ono zaoferować jakieś kluczowe ulepszenia w tradycyjnie wykorzystywanych metodach. Po pierwsze, w symulacjach Monte Carlo teorii z cechowaniem, fermiony są wycalkowywane, co prowadzi do pojawienia się wyznacznika fermionowego, będącego dominującym kosztem symulacji. Transformacja do zmiennych spinowych zamiast wycalkowania fermionów może znacząco obniżyć koszt symulacji. Po drugie, dualności pomiędzy dwoma opisami tego samego układu są interesujące same w sobie i doprowadziły w przeszłości do interesującego wglądu w fizykę wielu modeli. Doktorant wymienia klasyczne przypadki dualności elektromagnetycznej, dualności Kramersa-Wanniera dla modelu Isinga i szeroko wykorzystywanej w ostatnich latach korespondencji AdS/CFT. Następnie, przechodzi do analizowanych w ostatnich latach dualności zwanych lokalnymi bozonizacjami w sformułowaniu Chena-Kapustina-Radicevica

oraz słynnym podejściu Kitaeva. Prowadzi to Doktoranta do krótkiej dyskusji trzeciej perspektywy – wykorzystania proponowanego podejścia w obliczeniach kwantowych.

Rozdział 2 poświęcony jest szczegółowej dyskusji przejścia od zmiennych fermionowych do spinowych. Szczegółowo przywołana jest transformacja JW i Autor pokazuje jak proponowane podejście działa w jednym wymiarze, sprowadzając się do transformacji JW poprzez odpowiedni wybór postaci zmiennych linkowych S, \tilde{S} , konstruowanych ze zmiennych Clifforda X i Y . Następnie, Doktorant przechodzi do przypadku dwuwymiarowego i naturalnego uogólnienia układu swobodnych fermionów dla sieci 2D. Kluczowy dla dalszych rozważań jest fakt, że jednowymiarowa reprezentacja spinowa wykorzystuje macierze Pauliego, podczas gdy w 2D pojawiają się 4×4 macierze Diraca, oznaczane Γ . Oznacza to znaczące zwiększenie liczby stopni swobody i równoważność opisu fermionowego/spinowego wymaga wprowadzenia ograniczeń, które muszą spełniać macierze spinowe. Autor wprowadza operatory plakietkowe i operatory linii Polyakova oraz odpowiednie operatory rzutowania na podprzestrzeń spinowej przestrzeni Hilberta odpowiadającej fermionowej przestrzeni Hilberta. Pokazuje też warunek kiedy ograniczenia są spełnione. Rozdział kończy omówienie przypadku obecności zewnętrznego pola magnetycznego.

Trzeci rozdział opisuje konstrukcję ograniczeń i Hamiltonianu w reprezentacji spinowej, w bazie wygodnej z punktu widzenia numeryki. Przedstawiona jest implementacja w Mathematicie, z pełnym kodem zawartym w jednym z dodatków.

W rozdziale 4 analitycznie wyprowadzone są wyrażenia na spektrum energetyczne Hamiltonianu dla przypadku 1D oraz 2D bez pola oraz z zewnętrznym polem magnetycznym. Materiał ten jest raczej podręcznikowy, ale przygotowuje grunt pod numeryczne sprawdzenie wyników uzyskanych przy zaprzęgnięciu aparatu uogólnienia transformacji JW.

To numeryczne sprawdzenie przedstawione jest w rozdziale 5 dla małych sieci dwuwymiarowych – 3×3 , 4×3 i 4×4 , reprezentujących różne jakościowo z punktu widzenia ograniczeń przypadki nieparzystej lub parzystej liczby węzłów sieci. Z jednej strony Doktorant dysponuje więc ścisłymi wzorami wyprowadzonymi w rozdziale 4, a z drugiej wynikami numerycznej diagonalizacji Hamiltonianu w reprezentacji spinowej. Szczegółowa analiza wykazuje oczekiwaną równoważność reprezentacji fermionowej i spinowej.

Podsumowując zawartość rozprawy, Doktorant wykazał, że proponowane uogólnienie transformacji JW „działa”. Wywód jest logicznie poprowadzony, zaczynając od przedstawienia motywacji takich badań, poprzez wyprowadzenie niezbędnych elementów, aż po porównanie wynikających z metody rezultatów numerycznych ze wzorami analitycznymi

dla prostego układu dwuwymiarowego. Lektura rozprawy nasuwa kilka naturalnych pytań dotyczących perspektyw tego podejścia, które przedstawiam poniżej.

1. Na ile przejście z reprezentacji fermionowej do spinowej może być zautomatyzowane – np. czy zmiana rozmiaru sieci wymaga wyprowadzeń analitycznych, czy da się prosto wyrazić w formie algorytmu?
2. Jakie są perspektywy zastosowania metody do bardziej skomplikowanych układów dwuwymiarowych? Co byłoby potrzebne żeby wykorzystać ją np. do analizy modeli typu Hubbarda? A co z przypadkiem teorii pola z cechowaniem, np. (2+1)-wymiarowej elektrodynamiki kwantowej?
3. W powiązaniu z poprzednim pytaniem, na ile wyprowadzenie przedstawione w rozprawie dla układów swobodnych fermionów wykorzystuje szczególne własności tego przypadku, rozwiązywalnego analitycznie? Czy pojawienie się oddziaływań modyfikuje sposób postępowania i wymaga jakichś jakościowych zmian, czy jest niemal automatyczne i prowadzi jedynie np. do nieco bardziej skomplikowanej postaci ograniczeń?
4. Jakie mogłyby być zalety metody z punktu widzenia podejścia sieci tensorowych? Jak wspomniałem wyżej, 1D sieci tensorowe (*matrix product states*) rutynowo wykorzystują transformację JW, co znacząco upraszcza implementację. W dwóch wymiarach, np. w metodzie *projected entangled pair states* (PEPS) również łatwiej posługiwać się reprezentacją spinową niż użyć aparatu fermionowych PEPS, co pozwala uniknąć pewnych komplikacji. Z drugiej strony jednak, samo wyprowadzenie reprezentacji spinowej w oparciu o metodę opisaną w rozprawie i konstrukcja odpowiedniego Hamiltonianu zwiększa poziom komplikacji na innym etapie. Chciałbym więc prosić Doktoranta o komentarz jak widzi porównanie tych poziomów komplikacji pojawiających się na nieco innym etapie implementacji.
5. Podobnie w przypadku potencjalnego zastosowania na komputerach kwantowych – z jednej strony reprezentacja spinowa oszczędza pewnych komplikacji, a z drugiej strony wprowadza je na innym etapie. Czy w tym przypadku da się ocenić ostateczny zysk z zastosowania metody?
6. Prosiłbym również o krótkie omówienie elementów dodatkowych w przedstawionej rozprawie w porównaniu z pracą Phys. Rev. D102 (2020) 114502, współautorstwa Doktoranta, jednego z Promotorów i dwóch dodatkowych Autorów.

Pojawienie się powyższych pytań nie umniejsza w żadnym razie mojej pozytywnej oceny pracy. Uważam, że tego typu badania, nieco poza głównym nurtem współczesnej fizyki, powinny być prowadzone i mogą z nich wynikać nowe użyteczne metody, dające rzeczywisty postęp w analizach wielu modeli. Jest więc dla mnie niezwykle intrygujące czy przedstawiona metoda może znaleźć szersze zastosowanie do układów, dla których wykorzystanie standardowych metod jest trudne. Jasnym jest dla mnie, że w przypadku oddziaływającym musi być trudniej niż dla swobodnych fermionów, więc decydującym czynnikiem wydaje się być na ile trudności narastają w obecności oddziaływań, np. przyciągania/odpychania na węzle jak w modelu Hubbarda czy też wprowadzenia pól cechowania.

Podsumowując, rozprawa doktorska Pana mgr. Adama Wyrzykowskiego spełnia w mojej ocenie formalne i zwyczajowe kryteria stawiane takim rozprawom i wnoszę o dopuszczenie Doktoranta do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



.....
Krzysztof Cichy