

Recenzja rozprawy doktorskiej Pana mgr. Piotra Czarnika p.t.:

"Time evolution of quantum tensor networks"

Recenzowana rozprawa doktorska poświęcona jest jednej z nielicznych technik obliczeniowych, które mogą być stosowane do badania kwantowych układów, w których oddziaływanie powoduje, że do ich opisu nie wystarcza landauowska teoria cieczy Fermiego. Nie tylko liczba tych metod jest mała, ale także zakres ich stosowalności często ograniczony. Metody dokładnej diagonalizacji (np. metodę Lanczösa) można stosować jedynie do niewielkich układów, z dala od granicy termodynamicznej, kwantowe metody Monte Carlo w przypadku układów fermionowych – a te są dla nas najbardziej interesujące – borykają się ze słynnym *problemem znaku*, wiarygodność metody dynamicznego pola średniego, która jest dokładna w $D = \infty$, staje pod znakiem zapytania w przypadku układów niskowymiarowych, metody funkcjonałów gęstości zazwyczaj nie jest w stanie poprawnie opisać układy z silnymi korelacjami, obliczenia perturbacyjne często nie są możliwe ze względu na brak małego parametru, itd. Z drugiej strony układy z oddziaływaniem, zwłaszcza gdy energia oddziaływania może konkurować z energią kinetyczną elektronów, to grupa układów wykazujących bardzo bogate i ciekawe własności, jak na przykład nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe, którego mechanizm do dzisiaj nie jest w pełni znany. Dlatego też każda z metod obliczeniowych, które mogą być użyte do badania tych układów, a tym samym wnieść coś do naszej o nich wiedzy, zasługuje na baczną uwagę. To też sprawia, że tematykę recenzowanej rozprawy – jeszcze nie wnikając w jej merytoryczną treść – należy ocenić jako interesującą i aktualną.

Podejście, które jest rozwijane w ramach doktoratu Pana mgr. Piotra Czarnika, oparte jest o kwantowe sieci tensorowe. Jest to podejście znacznie różniące się od większości tradycyjnych metod znajdowania stanu układu

kwantowego. Używa innej metodologii i innego języka. Mimo, że metody te używane są już od dłuższego czasu (np. prace White dotyczące *Density Matrix Renormalization Group* pochodzą z 1992 roku), to szybki i wielokierunkowy rozwój tych metod w ostatnich latach spowodował, że stosowane nazewnictwo jest niesłychanie rozbudowane i może wprowadzić w konsternację każdego, kto próbuje zgłębić tą tematykę. Żeby uniknąć problemów ze znajdowaniem adekwatnych polskich odpowiedników angielskich określeń, w recenzji będę czasami posługiwał się oryginalną pisownią angielską.

Przygotowując rozprawę Pan mgr Piotr Czarnik skorzystał z nowelizacji „*Ustawy o stopniach naukowych...*”, która pozwoliła, żeby rozprawę stanowił spójny tematycznie zbiór artykułów opublikowanych lub przyjętych do druku. I tak na recenzowaną rozprawę składa się pięć artykułów opublikowanych w *Physical Review B*. We wszystkich artykułach doktorant jest pierwszym autorem; we wszystkich jednym z autorów jest też jego promotor, prof. Jacek Dziarmaga. Prace zostały opublikowane w latach od 2012 do 2016. Oto ich lista:

1. Piotr Czarnik, Łukasz Cincio, and Jacek Dziarmaga, „*Projected entangled pair states at finite temperature: Imaginary time evolution with ancillas*”, *Phys. Rev. B* **86**, 245101 (2012),
2. Piotr Czarnik and Jacek Dziarmaga, „*Fermionic projected entangled pair states at finite temperature*”, *Phys. Rev. B* **90**, 035144 (2014),
3. Piotr Czarnik and Jacek Dziarmaga, „*Projected entangled pair states at finite temperature: Iterative self-consistent bond renormalization for exact imaginary time evolution*”, *Phys. Rev. B* **92**, 035120 (2015),
4. Piotr Czarnik and Jacek Dziarmaga, „*Variational approach to projected entangled pair states at finite temperature*”, *Phys. Rev. B* **92**, 035152 (2015),
5. Piotr Czarnik, Jacek Dziarmaga, and Andrzej M. Oleś, „*Variational tensor network renormalization in imaginary time: Two-dimensional quantum compass model at finite temperature*”, *Phys. Rev. B* **93**, 184410 (2016).

Doktorant najprawdopodobniej bardzo wąsko zinterpretował ustawowe określenie „spójnego tematycznie” i w rozprawie nie zawarł pracy

- Piotr Czarnik and Jacek Dziarmaga, „*Striped critical spin liquid in a spin-*

orbital entangled RVB state in a projected entangled-pair state representation", Phys. Rev. B **91**, 045101 (2015).

W mojej opinii tematyka pracy jak najbardziej mieści się w nurcie obejmującym pięć prac składających się na rozprawę i z powodzeniem mogła być do niej włączona.

Kolejna praca

- Piotr Czarnik, Marek M. Rams, Jacek Dziarmaga, „*Variational tensor network renormalization in imaginary time: benchmark results in the Hubbard model at finite temperature*”, arXiv:1607.04016 [cond-mat.str-el]

została dopiero przed miesiącem umieszczona w bazie preprintów, więc najprawdopodobniej nie jest jeszcze nigdzie opublikowana. Niemniej poziomem nie odbiega ona od pozostałych prac, można więc przypuszczać, że wkrótce także ukaże się drukiem w bardzo dobrym czasopiśmie. Być może w dorobku doktoranta znajdują się jeszcze inne prace, których nie udało mi się znaleźć (niestety, w „przewodniku” dołączonym do rozprawy nie ma listy publikacji doktoranta, które nie wchodzi w jej skład). Ale nawet jeśli Pan mgr Piotr Czarnik nie jest autorem żaden innej pracy, to powyższy przegląd pozwala stwierdzić, że jego dorobek jest imponujący.

Ponieważ wszystkie publikacje składające się na rozprawę przeszły już przez sito ostrej selekcji w Physical Review B, trudno spodziewać się że ponowne szczegółowe zrecenzowanie zmieni ich pozytywną ocenę. Dlatego zamiast koncentrować się oddzielnie na każdej z publikacji, postaram się dokonać całościowego spojrzenia na cały cykl. Jest to o tyle uzasadnione, że publikacje rzeczywiście są ściśle ze sobą związane i w wielu przypadkach kolejna jest rozszerzeniem wcześniejszej. Artykuły stanowiące rozprawę uzupełnione są wspomnianym wyżej „przewodnikiem”. Nie jest to jednak typowe w przypadku rozpraw w postaci cyklu artykułów omówienie poszczególnych prac, a raczej całościowe przedstawienie omawianych w rozprawie zagadnień z rzadkimi jedynie odwołaniami do konkretnych publikacji doktoranta. Przewodnik pod względem edytorskim pozostawia nieco do życzenia, zawierając stosunkowo dużą liczbę literówek i innych czysto technicznych niedociągnięć. Ale nie to jest tematem oceny,

więc nie będę się nad tym zatrzymywał.

Standardowe podejście do prób zrozumienia własności wspomnianych na początku recenzji „egzotycznych” układów polega na zaproponowaniu uproszczonego modelu, który opisuje podstawowe oddziaływania w realnych materiałach. Przykładami takich modeli to mogą być modele spinowe, model Hubbarda, model t - J , itp. Mimo, że wyglądają one prosto, poza szczególnymi przypadkami nie znamy ich analitycznych rozwiązań. Głównym narzędziem ich badania pozostają więc metody numeryczne, niestety obarczone poważnymi ograniczeniami, także wspomnianymi na początku. Jedną z tych metod jest metoda sieci tensorowych, będąca tematem recenzowanej rozprawy. Nazwa ta obejmuje wiele bardzo różnych szczegółowych metod, z których każda ma swoje zalety i wady oraz swój obszar stosowalności. Pan mgr Piotr Czarnik skoncentrował się metodach, które pozwalają symulować stan termiczny skorelowanych układów dwuwymiarowych. W pracach stan układu (reprezentowany przez „*projected entangled pair state*”, PEPS – dwuwymiarowe uogólnienie „*matrix product states*”) w danej temperaturze obliczany jest przez ewolucję w urojonym czasie stanu układu znajdującego się w nieskończonej temperaturze. W elementarnych krokach w czasie operator ewolucji jest przedstawiany z pomocą rozkładu Suzuki-Trottera. Podstawowy problem, z którym doktorant starał się zmierzyć w swoich pracach, to utrzymanie „*bond dimension*” w granicach pozwalających na numeryczną symulację. Trzeba to jednak było zrobić tak, żeby zastosowane przybliżenie nie zniszczyło wiarygodności wyników. I właśnie wprowadzone przez Pana mgr. Piotra Czarnika metody pozwalające na efektywne obliczenia, np. wariacyjna renormalizacja operatora Gibbsa, są jego znaczącym wkładem w rozwój metod obliczeniowych opartych o sieci tensorowe dla skończonych temperatur. Oczywiście wiarygodność stosowanych przybliżeń trzeba było zweryfikować. W tym celu obliczenia były przeprowadzane zarówno dla układów, dla których znane są dokładne rozwiązania, jak i dla układów, w przypadku których rozwiązania otrzymane z pomocą sieci tensorowych można było porównać z rozwiązaniami otrzymanymi innymi metodami numerycznymi. W szczególności doktorant przeprowadził obliczenia m.in. dla modelu Isinga w poprzecznym polu, bezspinowego modelu Hubbarda z parowaniem typu „ p ”, czy modelu kompasów. We wszystkich tych przypadkach proponowane podejścia dawały wiarygodne wyniki. Oczywiście bardzo dobrze, że proponowana metoda przechodzi testy. Ale chętnie dowiedziałbym się, czy wniosła ona też coś

nowego do naszego zrozumienia fizyki skorelowanych układów dwuwymiarowych, czy może na razie jedynie pozwoliła odtworzyć wcześniej istniejące rozwiązania? Jest to może bardziej ogólne pytanie dotyczące metod opartych o sieci tensorowe. O ile wiadomo, że w jednym wymiarze dostaliśmy przy ich pomocy sporą liczbę ciekawych wyników, które nie były możliwe do uzyskania innymi metodami, to nie jest dla mnie do końca jasne jak to jest w przypadku większej liczby wymiarów. Czy sytuacja nie jest tu podobna do tej, z którą mamy do czynienia w przypadku symulacji w zimnych gazach atomowych? Tam, pomimo niesamowitego postępu w technikach studzenia i manipulowania atomami i molekułami, ani jeden nierozwiązany wcześniej problem fizyki materii skondensowanej nie został przy ich pomocy rozwiązany. Przykładowo, choć prowadzonych jest dużo symulacji fermionowych modeli na sieci z oddziaływaniem, nie dały one odpowiedzi na pytanie, czy możliwe jest parowanie w modelu Hubbarda do dodatnim U .

Druga kwestia, którą chciałbym poruszyć to sprawa przyszłości i dalszego rozwoju zaproponowanych w rozprawie metod. Wszystkie przedstawione tam obliczenia dotyczą ewolucji w urojonym czasie, co pozwala na znalezienie stanu termicznego różnych modeli. Czy podejścia te dałoby się zaadoptować do opisu ewolucji w czasie rzeczywistym? Aktualnie jednym z gorących tematów jest problem termalizacji układów z oddziaływaniem, w tym kwestia lokalizacji wielociałowej („*many-body localization*”). Używany w obliczeniach operator Gibbsa sugeruje ewolucję stanu równowagowego. Ale czy metody te mogłyby być użyte do badania ewolucji stanu z dala od równowagi termodynamicznej?

W konkluzji swojej recenzji z pełnym przekonaniem stwierdzam, że rozprawa Pana mgr. Piotra Czarnika w pełni spełnia wymagania stawiane rozprawom doktorskim w *Ustawie o stopniach naukowych i tytule naukowym*, jednocześnie wnosząc o dopuszczenie doktoranta do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Dodatkowo, ze względu na aktualność tematyki, liczbę i jakość uzyskanych wyników oraz bogaty dorobek doktoranta wnioskuję o wyróżnienie rozprawy.



Maciej Maśka