

Recenzja rozprawy doktorskiej Pana mgr. *Aritra SINHA*:  
**Time Evolution of Quantum Many-body Systems  
using Tensor Network States**

## 1 Uwagi wstępne

Forma drukowana prezentowanej rozprawy obejmuje 91 stron włączając w to 3 kluczowe artykuły naukowe na bazie, których rozprawa została opracowana. Praca napisana jest w języku angielskim i zawiera: • stronę tytułową • stosowne oświadczenie • abstrakt w języku polskim i angielskim • podziękowania • spis treści • 5 rozdziałów oraz • wykaz literatury.

Promotorem oraz promotorem pomocniczym są: prof. dr hab. Jacek Dziarmaga oraz dr hab. Marek Rams z Instytutu Fizyki im. Mariana Smoluchowskiego (Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej) Uniwersytetu Jagiellońskiego.

Tytuł pracy oddaje jej zawartość a przyjęty układ pracy jest właściwy. Zawartości kolejnych rozdziałów stanowią wyniki wpisujące się w tematykę ewolucji czasowej w układach wielu ciał kwantowych oraz zaawansowanych metod numerycznych (sieci tensorowe) służących symulacji jedno- i dwuwymiarowych układów fizycznych. Treść rozdziałów jest zgodna z nadanymi im tytułami.

Praca zawiera wyniki opublikowane wcześniej przez Autora w formie artykułów naukowych:

- A1 Inhomogeneity induced shortcut to adiabaticity in Ising chains with long-range interactions, Aritra Sinha, Debasis Sadhukhan, Marek M. Rams, and Jacek Dziarmaga, *Phys. Rev. B* **102**, 214203 (2020).
- A2 Non-adiabatic dynamics across a first order quantum phase transition: Quantized bubble nucleation, Aritra Sinha, Titas Chanda, Jacek Dziarmaga, *Phys. Rev. B* **103**, L220302 (2021).

A3 Finite temperature tensor network study of the Hubbard model on an infinite square lattice, Aritra Sinha, Marek M. Rams, Piotr Czarnik, and Jacek Dziarmaga, *Phys. Rev. B* **106**, 195105 (2021).

W tym miejscu warto nadmienić, iż Pan Sinha jest również autorem 3 kolejnych artykułów naukowych blisko tematycznie związanych z rozprawą doktorską lecz formalnie nie będących jej częścią:

A4 Time-dependent reflection at the localization transition, Sergey E. Skipetrov, Aritra Sinha, *Phys. Rev. B* **97**, 104202 (2018).

A5 Kibble-Zurek mechanism with a single particle: Dynamics of the localization- delocalization transition in the Aubry-André model, Aritra Sinha, Marek M. Rams, and Jacek Dziarmaga, *Phys. Rev. B* **99**, 094203 (2019).

A6 Sonic horizons and causality in phase transition dynamics, Debasis Sadhukhan, Aritra Sinha, Anna Francuz, Justyna Stefaniak, Marek M. Rams, Jacek Dziarmaga, and Wojciech H. Zurek, *Phys. Rev. B* **101**, 144429 (2020).

Wszystkie 6 przytoczonych artykułów naukowych zostało opublikowanych w czasopiśmie *Physical Review B* posiadającym Impact factor **3.908**.

## 2 Przedmiot rozprawy

Po wprowadzeniu (rozdział 1), w rozdziale drugim Autor omawia kwantowe przejścia fazowe oraz dynamikę z nimi związaną (*ang.* slow quench). W szczególności omawiany jest:

1. podstawowy aparat pojęciowy i matematyczny do opisu ewolucji w czasie układów wielu ciał kwantowych, przy szczególnym uwzględnieniu tematów związanych z głównymi wynikami pracy doktorskiej (np. mechanizm Kibble-Zurek).
2. ewolucje (nie)adiabaticzną przez punkt krytyczny pierwszego i drugiego rodzaju,
3. ewolucje w czasie urojonym wraz z algorytmem wyznaczania stanu podstawowego za jej pomocą.

Następnie w rozdziale trzecim Autor, rozważa jednowymiarowe (1D) układy wielu cząstek oraz przedstawia algorytmy bazujące na technikach związanych sieciami tensorowymi a służące do ich symulacji. W szczególności omawiane kluczowe algorytmy wykorzystane w pracach [A1] oraz [A2]:

1. DMRG (*ang.* Density Matrix Renormalization Group),
2. TDVP (*ang.* Time Dependent Variational Principle).

Rozdział czwarty, przedstawia uogólnienia na przypadek dwuwymiarowy (2D). W szczególności dyskutowana jest

1. główna motywacja do badania modelu Fermi-Hubbard w skończonej temperaturze,
2. algorytm oparty na FPEPS (*ang.* Fermionic Projected Entangled Pair States) wykorzystany w pracy A3.

Opisane rozdziały przedstawiają motywację oraz nadają kontekst prowadzonym przez Autora badaniom naukowym pozwalając tym samym na ich uplasowanie w szerokim kontekście badań prowadzonych na świecie.

Kluczowy jest rozdział piąty przedstawiający główny wynik naukowy Autora, będący przedmiotem niniejszej recenzji. Technicznie rozdział ten składa się z trzech załączonych publikacji naukowych (tj. [A1], [A2], [A3] przytoczone powyżej) opatrzonych jednostronicowym komentarzem, i tak:

1. w artykule [A1] autorzy zbadali efekty powolnego, niejednorodnego przestrzennie “schładzania” (*ang.* quench) przez punkt krytyczny drugiego rodzaju w modelu Isinga z dalekosiężnym oddziaływaniem. Stwierdzono związek między fazą adiabatyczną niejednorodnego przejścia a fazą Kibble-Zurek’a (KM). Ustalono że to przejście zachodzi analogicznie jak dla przypadku jednorodnego, pomimo że oddziaływanie jest nielokalne. Taki wynik mógłby sugerować, że oddziaływanie może natychmiastowo przekazać informację o pierwotnym złamaniu symetrii przed krytyczny front, prowadząc do tłumienia wzbudzeń w fazie ze złamana symetrią. Jednakże tak się nie dzieje kiedy prędkość przestrzenna krytycznego frontu przekracza pewną charakterystyczną wartość, którą można wyprowadzić z niejednorodnego mechanizmu KM. Autorzy potwierdzili ten fakt numerycznych (symulacji za pomocą techniki MPS - Matrix Produkt State). Okazuje się ponadto, iż nachylenie krytycznego frontu można dostosować w celu osiągnięcia adiabatycznego przejścia w krótszym czasie niż najkrótszy czas możliwy do osiągnięcia korzystając z jednorodnego protokołu.
2. W artykule [A2] autorzy rozważyli adiabatyczne “schładzanie” (*ang.* quench) przez punkt krytyczny pierwszego rodzaju. W pracy tej wykazali, że metastabilność związana z przejściem fazowym pierwszego rodzaju w kwantowym modelu Isinga jest utracona podczas kolejnych etapów ewolucji. Jako przyczynę tego faktu autorzy wskazali **skwantowaną nukleację pęcherzyków** (*ang.* quantized bubble nucleation) gdzie przymiotnik kwantowy odnosi się do dyskretnych rozmiarów obszarów spinowych, których istnienie uzasadnić można względami energetycznymi. Autorzy wskazali również konkretne rezonansowe obszary w polu podłużnym ( $h_z = 2/n$ ), w których metastabilne stany mogą tunelować, tworząc pęcherzyki o określonym rozmiarze  $n$ , które są procesami  $n$ -tego rzędu w rachunku zaburzeń ze względu na poprzeczne pole  $h_x$ . Okazuje się również, że taki nieadiabatyczny proces można wyjaśnić za pomocą teorii Landaua-Zenera (LZ). Przy niskiej gęstości pęcherzyków, nukleacja może być rozumiana poprzez teorię dwupoziomowego przejścia LZ, podczas gdy przy wyższych gęstościach, odpowiedni do opisu fizyki takiego procesu staje się wielopoziomowy model LZ. Wyniki te można uogólnić do wyższych wymiarów oraz na innych modele przejawiające kwantowe przejście pierwszego rodzaju. Warto nadmienić, iż model Isinga z poprzecznym

połem, realizowany np. za pomocą łańcucha atomów Rydberga, stanowił doskonałą platformę eksperymentalną do badania zagadnień związanych z teorią KZ. Można zatem oczekiwać, iż w niedalekiej przyszłości będzie również możliwa eksperymentalna weryfikacja teorii zaproponowanej przez autorów.

3. W artykule [A3] autorzy podjęli się trudnego zadania jakim jest badanie właściwości termicznych modelu Fermiego Hubbarda w dwóch wymiarach. W pracy wykorzystano dobrze znany algorytm oparty o sieci tensorowe usprawniony algorytmicznie o rozwiązanie, które umożliwiło wykorzystanie symetrii abelowych w obliczeniach numerycznych. Bez tych dodatkowych usprawnień nie byłoby możliwe uzyskanie precyzyjnych wyników dla dwupunktowych korelacji dla umiarkowanych temperatur. Autorzy uzyskali również wyniki dla temperaturach przekraczających współczesne możliwości eksperymentalne i numeryczne w kontekście prawdziwie dwuwymiarowych systemów, pracujących bezpośrednio w granicy termodynamicznej. Wyniki tego typu mogą służyć jako punkt odniesienia dla przyszłych eksperymentów i metod numerycznych.

We wszystkich trzech artykułach Pan mgr Aritra SINHA jest pierwszym autorem. Zwyczajowo przyjąć więc można, iż jego wkład w uzyskanie oraz opublikowanie omówionych powyżej wyników badań naukowych jest znaczący a bez jego udziału nie byłoby to możliwe.

### 3 Uwagi techniczne *nie* wpływające na część merytoryczną

Pracę czyta się bardzo dobrze od strony technicznej. W mojej ocenie nie jest ona ani zbyt długa ani zbyt krótka. Wszystkie rysunki są czytelne, a większość odnośników opatrzona jest aktywnym linkiem pozwalającym szybko wyszukać źródło. Poniżej przedstawiam uwagi techniczne, które w żaden sposób *nie* wpływające na ocenę merytoryczną rozprawy:

- 1a. Strona 1: Jest Phys. Rev. B **102**, 235112 a powinno być Phys. Rev. B **102**, 214203.
- 1b. Strona 1: Jest Phys. Rev. B **103**, 220303 a powinno być Phys. Rev. B **106**, 195105.
2. Figura 3.2 na stronie 15:

$$C_{ij} = \sum_{m,n,o,p,q} A_{inm} B_{nqo} C_{moqpj} D_{pq} \rightarrow C_{ij} = \sum_{m,n,o,p,q} A_{inm} B_{nqo} C_{moqpj} D_{pq}, \quad (1)$$

$$C_i = \sum_j A_{ji} B_i \rightarrow C_i = \sum_j A_{ji} B_i. \quad (2)$$

3. Jakość niektórych figur mogłaby być lepsza, np. Fig. 3.11, Fig. 3.10.
4. Wielu pozycjom literatury brakuje aktywnego identyfikatora DOI (klikalny link) pozwalającego szybko wyszukać daną pozycję (np. [25], [26], [31], [32]). Wynika to z przyjętego, raczej arbitralnie, stylu prezentowania literatury.

5. Wzór (3.21)

$$H = - \sum_{n=1}^N \left( h_n \sigma_n^z + \sum_n \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x \right) \rightarrow H = - \sum_{n=1}^N h_n \sigma_n^z - \sum_n \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x. \quad (3)$$

Opracowane metody numeryczne, które ostatecznie posłużyły do otrzymania wyników doktoratu, plasują się na bardzo wysokim światowym poziomie. Tym bardziej zastanawiające jest dlaczego autor nie zdecydował się udostępnić kodu źródłowego opracowanych przez siebie algorytmów wraz ze skryptami [np. za pomocą serwisu github lub gitlab w trybie otwartego dostępu (*ang.* open source)], które finalnie posłużyły do wygenerowania ostatecznych wyników. Jedyna referencja do kodu źródłowego jaką udało mi się odnaleźć, <https://gitlab.com/marekrams/yast>, należy do promotora pomocniczego Pana dr. hab. Marka Ramsa.

## 4 Ocena końcowa i wnioski

Rozprawa doktorska Pana Aritra Sinha pt. "*Time Evolution of Quantum Many-body Systems using Tensor Network States*" dotyczy ważnego zarówno poznawczo jak i aplikacyjne problemu oraz stanowi wartościowe osiągnięcie naukowe Autora. Pomimo, iż sam Autor w pracy o tym fakcie nie wspomina, uzyskane przez niego wyniki można rozpatrywać z punktu widzenia potencjalnych praktycznych zastosowań np. do analizy kwantowych komputerów, w szczególności kwantowych wyzarzacz (*ang.* quantum annealers). Te ostatnie dostarczają idealnej platformy eksperymentalnej pozwalającej badań przejścia fazowe [np. *Nature* **617**, 61–66, (2023)]. Z drugiej strony badania nad zagadnieniami będącymi przedmiotem niniejszej rozprawy mogą posłużyć do walidacji i testowania technologii kwantowej (zarówno tej dostępnej obecnie jak i jej przyszłych generacji), np. *Sci. Rep.* **8**, 4539 (2018).

Podsumowując, w mojej ocenie Doktorant rozwiązał postawione problemy badawcze i użył do tego celu właściwych metod badawczych. W mojej ocenie jego oryginalnym osiągnięciem są:

1. wykazanie, dla modelu Isinga z dalekosiężnym oddziaływaniem, iż nachylenie krytycznego frontu można dostosować w celu osiągnięcia adiabatycznego przejścia w krótszym czasie niż najkrótszy czas możliwy do osiągnięcia korzystając z jednorodnego protokołu,
2. opracowanie teorii skwantowanej nukleacji pęcherzyków dla przejściu przez punkt krytyczny pierwszego rodzaju w modelu Isinga z poprzecznym polem,
3. wyznaczenie precyzyjnych wartości dwupunktowych funkcji korelacji dla umiarkowanych temperatur w dwuwymiarowym modelu Fermiego-Hubbarda.

**Uważam, że przedstawiona mi do oceny rozprawa doktorska spełnia z dużą nawiązką wymogi ustawowe stawiane pracom doktorskim w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne. Wnoszę zatem o jej przyjęcie przez Rade Dyscypliny Nauki fizyczne Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie oraz o dopuszczenie Pana mgr. Aritra Sinha do dalszych etapów przewodu doktorskiego.**

## Wniosek o wyróżnienie rozprawy

Rozprawa Pana mgr. Aritra Sinha związana jest z bardzo aktualną tematyką badawczą, która dotyczy badania własności układów wielu ciał kwantowych. Moim zdaniem, problem analizowany w rozprawie jest wyjątkowo złożony, gdyż wymaga opracowania oraz zaimplementowania bardzo skomplikowanych algorytmów numerycznych opartych o *tzw.* metody sieci tensorowych. Drobne uwagi krytyczne wskazane w recenzji dotyczą jedynie technicznych aspektów prezentacji wstępnej części rozprawy. Ze względu na bardzo wysoki poziom prowadzonych badań naukowych i znaczący dorobek publikacyjny dotyczący tematyki rozprawy, a w szczególności za **badania zagadnień adiabaticznej ewolucji przez punkt krytyczny pierwszego rodzaju i opracowanie teorii skwantowanej nukleacji pęcherzyków w modelu Isinga z poprzecznym polem**, wnoszę o wyróżnienie rozprawy Pana mgr. Aritra Sinha.

dr hab. Bartłomiej Gardas

