



Poznań, 16 sierpnia 2023 roku

prof. dr hab. Ireneusz Weymann  
Instytut Spintroniki i Informatyki Kwantowej  
Wydział Fizyki  
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

## Recenzja

rozprawy doktorskiej pani mgr Gabrieli Wójtowicz

pt. *“Extended Reservoir Approach for Quantum Transport and non-Markovian Dynamics”*

Przedłożona rozprawa doktorska pt. *„Extended Reservoir Approach for Quantum Transport and non-Markovian Dynamics”* została przygotowana pod opieką dra. hab. Marka Ramsa w Instytucie Fizyki im. Mariana Smoluchowskiego na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego. Tematyka dysertacji dotyczy badania własności dynamicznych i transportowych nanoskopowych układów kwantowych dołączonych do zewnętrznych elektrod metalicznych. Badania tego typu układów są prowadzone w wiodących ośrodkach naukowych na świecie, a od strony teoretycznej wymagają stosowania zaawansowanych metod numerycznych w celu poprawnego uwzględnienia efektów wielociałowych. Niewątpliwie jednym z ważniejszych narzędzi w tym kontekście są sieci tensorowe, które doskonale sprawdzają się w badaniu własności fizycznych układów o zredukowanych wymiarach, a ich ostatnio rozwijane implementacje pozwalają również symulować nierównowagowy transport kwantowy oraz dynamikę i zależności czasowe związane choćby z kwantowym wygaszaniem czy też periodycznym stymulowaniem układu. Problematyka niniejszej dysertacji dotyczy właśnie tego typu zagadnień. Głównym celem rozprawy jest rozwinięcie odpowiednich metod i narzędzi teoretycznych, zaimplementowanych w formalizmie sieci tensorowych, oraz przetestowanie ich stabilności i efektywności w kontekście kilku-węzłowych układów kwantowych dołączonych ze zewnętrznymi elektrodami. Mgr Wójtowicz w swojej rozprawie doktorskiej rozwija w szczególności podejście rozszerzonych rezerwuarów (ang. *extended reservoir approach, ERA*) do badania nierównowagowych stanów stacjonarnych oraz niemarkowskiej dynamiki układów nanoskopowych. Tego typu rozważania wpisują się najbardziej aktualne trendy badawcze w obszarze fizyki układów kwantowych ciała stałego, dlatego uważam, że wyniki przedstawione w rozprawie mają dużą wartość naukową. Dysertacja oparta jest o monotematyczny cykl pięciu artykułów naukowych, opublikowanych w wiodących międzynarodowych czasopismach fizycznych. Od strony formalnej rozprawa doktorska jest podzielona na dwie części – część pierwszą stanowi obszernie wprowadzenie do problematyki kwantowego transportu i dynamiki układów kwantowych oraz omówienie metod badawczych stosowanych w rozprawie, natomiast część druga prezentuje główne wyniki uzyskane przez Doktorantkę w formie załączonego cyklu pięciu publikacji.

Cześć pierwsza rozprawy doktorskiej składa się z sześciu rozdziałów, dwóch dodatków oraz spisu publikacji. W pierwszym rozdziale przedstawiono hamiltonian modelowy badanych układów, które składają się w ogólności z części centralnej dołączonej poprzez złącza tunelowe do dwóch zewnętrznych rezerwuarów fermionowych, do których przyłożona jest różnica potencjałów. Jest to typowa geometria układu mezoskopowego, badanego przy pomocy spektroskopii transportowej, w której nanoskopowa część centralna (wyspa, domieszka, kropka kwantowa czy też molekula) jest tunelowo sprzężona do lewej i prawej elektrody. Za najprostszymi, a zarazem sztandarowymi modelami tego typu, w których korelacje odgrywają istotną rolę, można uznać

model Andersona opisujący domieszki magnetyczne w metalach oraz jego rozszerzenia na nanoskopowe złącza tunelowe. W rozprawie rozpatrywano w szczególności modele rezonansowe, które były stosowane do testowania metod numerycznych, oraz ich kilkuwęzłowe wersje z uwzględnieniem korelacji elektronowych. W pierwszym rozdziale części pierwszej rozprawy omówiono również ewolucję układu dla stanu czystego i mieszanego, przybliżenie Borna i Markowa, a także przedstawiono równanie Goriniego-Kossakowskiego-Sudarshana-Lindblada opisujące czasową ewolucję kwantowego układu otwartego. Choć pierwszy rozdział jest zatytułowany „Transport kwantowy”, niewiele w nim transportu za wyjątkiem definicji operatora prądu. Natomiast właściwe równania transportowe przedstawiono w rozdziale drugim, gdzie zdefiniowano odpowiednie funkcje Greena i podano formułę Landauera dla układów nieoddziałujących oraz formułę Meira-Wingreena. Ta druga formuła opisuje transport przez podwójne złącza tunelowe, gdzie część centralna może wykazywać dowolne korelacje. Kluczową sprawą w badaniu transportu jest zatem wyznaczenie odpowiednich funkcji Greena. Od strony analitycznej, można tego dokonać stosując np. metodę równań ruchu, która jest jednak obciążona pewnymi przybliżeniami, ponieważ w przypadku układów oddziałujących, funkcji Greena nie można wyznaczyć w sposób ścisły. Z drugiej strony, w celu uwzględnienia zjawisk korelacyjnych w sposób ilościowo jak najbardziej dokładny istotne jest wyznaczenie funkcji Greena układu bez żadnych przybliżeń. Można tego dokonać stosując metody numeryczne, w których często dokonuje się odpowiedniej dyskretyzacji pasma elektronów przewodnictwa rezerwuarów, do których dołączona jest część centralna. Kolejne trzy rozdziały są właśnie poświęcone omówieniu wprowadzonego w dysertacji podejścia rozszerzonych rezerwuarów, w którym nieskończone rezerwuary są modelowane jako układy otwarte o skończonej liczbie modów. Kluczowym w tym podejściu jest założenie, że jeżeli rezerwuar jest przybliżony w taki sposób, że jego własności spektralne są poprawnie opisane, nierównowagowy stan stacjonarny całego układu może zostać wyznaczony z dobrym przybliżeniem. Wolne parametry w ERA to sposób dyskretyzacji oraz czas relaksacji,  $\sim 1/\gamma$ , który jest odwrotnie proporcjonalny do siły sprzężenia do dyssypacyjnego otoczenia  $\gamma$ . W rozdziale trzecim omówiono główne założenia ERA, w tym różne sposoby dyskretyzacji pasma przewodnictwa. Przeanalizowano także zależność prądu w stanie stacjonarnym od siły sprzężenia  $\gamma$ , wskazując na fizyczny zakres tego parametru, gdzie prąd nie zależy od  $\gamma$ . Kolejny rozdział jest poświęcony omówieniu procedury wyboru optymalnego rezerwuaru rozszerzonego. Dyskusja obejmuje analizę zachowania funkcji spektralnej rezerwuaru oraz lokalnej gęstości stanów części centralnej w zależności od  $\gamma$ . Wskazano także na pewne niefizyczne efekty, które mogą się pojawić, gdy dobór sposobu dyskretyzacji i siły sprzężenia dyssypacyjnego nie jest odpowiednio zoptymalizowany. Co istotne, pokazano, że modelowanie rezerwuarów nie może opierać się jedynie na uzyskaniu poprawnej funkcji spektralnej samego rezerwuaru, ale zależy także od specyfikacji części centralnej (domieszki) i istotnych skal energii w układzie, w tym siły sprzężenia domieszki do zewnętrznych elektrod. W rozdziale tym Doktorantka zdefiniowała również kryterium wyboru odpowiednich parametrów umożliwiające poprawny opis rezerwuarów. Kolejny rozdział prezentuje koncepcję symulacji równania opisującego czasową ewolucję macierzy gęstości w sposób dyskretny, ang. *accumulative reservoir construction* (ARC), gdzie układ ewoluuje bądź koherentnie bądź też dyssypacyjnie w określonych interwałach czasowych. Natomiast ostatni, szósty rozdział, jest poświęcony wprowadzeniu do formalizmu sieci tensorowych i omówieniu numerycznej implementacji podejścia rozszerzonych rezerwuarów, a także metod rozwiązywania równania Lindblada. Doktorantka przedstawia najbardziej efektywny Ansatz dla stanu początkowego, tj. stan typu MPS w bazie mieszanej (ang. *mixed basis Ansatz*), do przeprowadzenia symulacji czasowej ewolucji. Wskazuje również, że najbardziej stabilną metodą wyznaczania nierównowagowego stanu stacjonarnego jest zależna od czasu zasada wariacyjna (ang. *time-dependent variational principle*). Część pierwsza rozprawy zawiera również dwa dodatki, a całość jest zakończona obszerną, liczącą 113 pozycji, bibliografią. Chciałbym podkreślić, że, pomimo iż w pierwszej części pracy doktorskiej można znaleźć kilka niedociągnięć edytorskich, których trudno uniknąć przy edycji obszerniejszego tekstu, całość została przygotowana w sposób bardzo

staranny i merytorycznie dopracowany, co ma niewątpliwie także walory dydaktyczne. Przy dysertacjach przygotowywanych w formie cyklu artykułów, obszerniejsze wprowadzenie do problematyki dysertacji nie zawsze się pojawia, dlatego, moim zdaniem, niniejszą rozprawę można uznać za wzorcową. Mam jednak także pewien niedosyt związany z motywacją do prowadzenia badań przedstawionych w rozprawie. Otóż, we wstępie nie omówiono praktycznie żadnych nowych zjawisk fizycznych, które pojawiają się w układach kwantowych (a są niewidoczne w klasycznych układach masywnych), a które jednocześnie stanowią główną motywację do eksploracji tego typu układów i ich potencjalnych zastosowań w nowoczesnych technologiach kwantowych.

Druga część doktoratu przedstawia oryginalne wyniki badań przeprowadzonych przez Doktorantkę, zaprezentowanych w pięciu artykułach naukowych. Dwa artykuły ukazały się w *Physical Review B* oraz po jednym artykule ukazało się w *Physical Review A* jako *Rapid Communications* i w *The Journal of Chemical Physics*. Ostatni artykuł, załączony w formie preprintu, ukazał się niedawno w *Physical Review B*. W trzech pracach mgr Wójtowicz jest pierwszym autorem, natomiast w dwóch artykułach jest na drugim miejscu na liście autorów, przy czym w ostatnim artykule wkład dwóch pierwszych autorów jest równorzędny. Jak wynika z oświadczeń współautorów, w trzech pracach, gdzie Doktorantka jest pierwszym autorem, jej wkład był kluczowy, natomiast w dwóch pozostałych artykułach wkład Doktorantki oceniam jako bardzo istotny. Doktorantka przeprowadzała obliczenia numeryczne, brała udział w dyskusjach, interpretacji wyników, przygotowywała wyniki do publikacji oraz redagowała manuskrypty. Poniżej przedstawiam krótki opis każdej z prac wchodzących w skład rozprawy doktorskiej.

Pierwsza publikacja, pt. "*Open-system tensor networks and Kramers' crossover for quantum transport*", prezentuje koncepcję sieci tensorowych do badania własności transportowych oddziałujących układów otwartych. W szczególności, w pracy omówiono sposób symulacji dynamiki układu poprzez równanie Lindblada stosując podejście rozszerzonych rezerwuarów. Wyznaczono zależny od czasu prąd płynący przez układ, najpierw dla układu nieoddziałującego, uzyskując bardzo dobrą zgodność z wynikiem ścisłym, a następnie dla oddziałującego modelu rezonansowego, obejmującego dwa bezspinowe węzły z oddziaływaniem kulombowskim pomiędzy nimi. Ponadto, wyznaczono także zależność przewodności w funkcji temperatury oraz przyłożonego do układu napięcia. W pracy pokazano, że stosując ERA z odpowiednim Ansatzem dla stanu początkowego (stan z modami w lewej i prawej elektrodzie posortowanymi względem energii) oraz zastosowaniem zależnej od czasu zasady wariacyjnej można symulować dynamikę układu dla znacznie dłuższych czasów niż te osiągalne przez dotychczas stosowane metody. Jest to, moim zdaniem, najważniejszy artykuł doktoratu, na którym bazują kolejne prace.

Drugi artykuł, zatytułowany "*Dual current anomalies and quantum transport within extended reservoir simulations*", prezentuje systematyczną analizę wpływu parametrów modelujących rezerwuary oraz opisujących oddziaływanie rezerwuarów z domieszką na własności transportowe modelu rezonansowego bez oddziaływania oraz z oddziaływaniem. W przypadku układu oddziałującego rozpatrywano przypadek, gdy jeden z węzłów nie jest bezpośrednio sprzężony z lewym i prawym rezerwuarem, a układ tworzy geometrię typu „T”, oraz sytuację, gdy oba węzły, pomiędzy którymi występuje oddziaływanie, są połączone szeregowo z rezerwuarami. W szczególności badano zależność prądu od siły sprzężenia do otoczenia (ang. *Kramers turnover*), uwzględniając relaksację typu Markowa oraz relaksację niemarkowską. W pracy zidentyfikowano anomalne zachowanie prądu w zależności od wartości relaksacji  $\gamma$  oraz siły sprzężenia domieszki do rezerwuarów, wykazując istnienie pięciu różnych obszarów transportu w zależności od  $\gamma$ . Pokazano, że w przypadku słabego sprzężenia domieszki pojawia się anomalia wirtualna w obszarze słabego i umiarkowanego sprzężenia do otoczenia  $\gamma$ , natomiast gdy sprzężenie  $\gamma$  rośnie, pojawia się anomalia markowska. Pierwsza z anomalii wynika z wirtualnych przejść pomiędzy modami w lewej i prawej elektrodzie, natomiast druga jest związana z niefizycznym poszerzeniem rozkładu obsadzeń w rezerwuarach. W pracy wskazano

jak w optymalny sposób dobrać parametry opisujące rezerwuary, aby uzyskać fizyczne wyniki, także dla modeli wykazujących wielociałowe oddziaływania.

Kolejna praca, *Performance of reservoir discretizations in quantum transport simulations*, dotyczy badania wpływu różnych metod dyskretyzacji pasma przewodnictwa na symulacje transportu kwantowego, w szczególności na stabilność obliczeń i ich numeryczną efektywność. W publikacji przeanalizowano przypadki dyskretyzacji liniowej, liniowo-logarytmicznej oraz liniowo-odwrotnej, gdzie dla wszystkich przypadków dokonano liniowej dyskretyzacji w obrębie okna transportowego. Pokazano, że o ile sposób dyskretyzacji ma wpływ na wzrost efektywności obliczeń w przypadku modeli nieoddziałujących, dla skorelowanych układów, w przypadku realnych obliczeń w formalizmie sieci tensorowych, nie ma istotnej różnicy jeżeli chodzi o sposób dyskretyzacji pasma elektronów przewodnictwa. Jest to związane z dość intuicyjnym faktem, że zachowanie układu jest w znacznej mierze zdeterminowane przez mody rezerwuarów w oknie transportowym. Ponieważ dla rozważanych dyskretyzacji w tym zakresie energii zawsze stosowano dyskretyzację liniową, nie ma istotnych różnic związanych z inną dyskretyzacją stanów dla energii większych od przyłożonej różnicy potencjałów, tj. poza oknem transportowym. Praca dostarcza kolejnych informacji odnośnie doboru optymalnych parametrów modelowania rozszerzonych rezerwuarów, co jest niezmiernie istotne dla dalszych badań skorelowanych układów nanoskopowych w warunkach nierównowagowych.

Artykuł czwarty dysertacji, *Accumulative reservoir construction: Bridging continuously relaxed and periodically refreshed extended reservoirs*, prezentuje obszernie omówienie alternatywnej metody konstrukcji rezerwuarów rozszerzonych, ang. *accumulative reservoir construction*, w której następuje cykliczna relaksacja rezerwuaru tak, że jego reprezentacja wraz z upływem czasu akumuluje cechy rezerwuaru nieskończonego. W pracy badano różne obszary transportu w ramach ARC dla nieoddziałującej domieszki złożonej z trzech węzłów, z wyróżnionym węzłem środkowym, do którego symetrycznie dołączone były dwa sąsiednie węzły. Wyznaczono między innymi diagram fazowy układu wykazujący różne obszary transportu w zależności od całkowitej relaksacji oraz tzw. akcji – parametrów kontrolujących czasową ewolucję układu w ramach ARC. Pokazano, że przestrzeń fazowa związana z fizycznym zachowaniem własności transportowych dzieli się na reżimy relaksacji dyskretnej i ciągłej, a granica między nimi jest określona przez fizyczne skale czasowe. Zbadano również jak dokładność obliczeń oraz efektywność numeryczna zależy od obszaru transportu.

Z kolei ostatnia publikacja doktoratu, *Transport in a periodically-driven tilted lattice via the extended reservoir approach: Stability criterion for recovering the continuum limit*, dotyczy badania układów periodycznie napędzanych w ramach podejścia ERA. W pracy rozpatrzono model składający się z układu centralnego skonstruowanego z łańcucha o zadanej liczbie węzłów, których zarówno energie, jak i całki przeskoków mogą być zależne od czasu, dołączonego do zewnętrznych rezerwuarów – tego typu układ realizuje tzw. sieć przechyloną (ang. *tilted lattice*). W publikacji w sposób kompleksowy przebadano dynamikę takiego układu, testując jednocześnie odpowiednie parametryzacje rezerwuarów rozszerzonych w celu uzyskania fizycznie ważnych wyników. W przypadku zależnych od czasu hamiltonianów, wskazano na ważną rolę wyboru odpowiedniej dyskretyzacji pasma przewodnictwa elektrod. W pracy zaproponowano również kryterium stabilności, umożliwiające odpowiednie dobranie parametrów do prowadzenia symulacji numerycznych. Praca prezentuje jedno z pierwszych zastosowań podejścia rozszerzonych rezerwuarów do periodycznie sterowanych układów, torując tym samym drogę do dokładnych symulacji transportu kwantowego w zależnych od czasu modelach wykazujących nietrywialne korelacje, w tym w wielociałowych stanach Floqueta.

### **Podsumowanie**

Nie mam wątpliwości, że Doktorantka posiada głęboką wiedzę teoretyczną w zakresie fizyki ciała stałego, w szczególności dynamiki i transportu w układach kwantowych, potrafi

samodzielnie prowadzić badania i rozwiązywać zaawansowane problemy naukowe. W swojej dysertacji mgr Wójtowicz rozwinęła i zaadaptowała podejście rozszerzonych rezerwuarów do badania nierównowagowych stanów stacjonarnych oraz dynamiki skorelowanych układów nanoskopowych. Doktorantka przeprowadziła szereg zaawansowanych obliczeń numerycznych w oparciu o metody sieci tensorowych uzyskując nowe i interesujące wyniki, a także przeprowadzając odpowiednie testy w celu optymalizacji metody, które mają istotne znaczenie dla dalszych badań. Warto również podkreślić, że Doktorantka jest współautorem trzech innych publikacji, brała także udział w przygotowaniu otwartego pakietu YASTN, opracowanego w języku Python, dla sieci tensorowych z wykorzystaniem symetrii abelowych.

Biorąc powyższe pod uwagę, jestem przekonany, że rozprawa doktorska mgr Gabrieli Wójtowicz spełnia wszystkie wymagania stawiane kandydatom do stopnia naukowego doktora określone w Ustawie - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z 2020 roku. Ponadto, ze względu na wysoką jakość uzyskanych wyników, nietrywialne i nowoczesne metody obliczeniowe, a przede wszystkim wkład w rozwinięcie i adaptację nowych technik w formalizmie sieci tensorowych do badania nierównowagowego transportu i dynamiki kwantowych układów niskowymiarowych poza przybliżeniem Markowa, wnioskuję o wyróżnienie niniejszej rozprawy.

Hubert Weymann