

Recenzja rozprawy doktorskiej "The impact of the system parameters on the entanglement in spin chains coupled to the bosonic reservoir" autorstwa mgr. inż. Michała Kaczora napisanej pod kierunkiem dr hab. Pawła Jakubczyka, prof. UR

Rozprawa liczy 173 strony napisana jest w języku angielskim i składa się z czterech rozdziałów (plus wprowadzenie po polsku i po angielsku oraz podsumowanie). Pierwsze trzy rozdziały mają charakter wprowadzający, a ostatni opisuje wyniki badań uzyskanych przez doktoranta i jego współpracowników, opublikowanych w pięciu czasopismach, z których cztery można określić jako renomowane. Praca opatrzona jest bogatą bibliografią liczącą 136 pozycji, a szczegółowy przegląd aktualnego stanu badań przedstawiony jest na 10 stronach w podrozdziale 3.2. Przed bibliografią autor prezentuje swoją bogatą aktywność konferencyjną.

Pierwsze trzy rozdziały są rozdziałami wprowadzającymi. Pierwszy z nich wprowadza do mechaniki kwantowej wielu częstek, nierówności Bella, splątania dwu- i wielocząstkowego, kwantowego discordu, kryteriów i miar splątania.

Rozdział drugi dotyczy dynamiki układów otwartych, równań master, markowowskiej i niemarkowowskiej dynamiki. Rozdział trzeci dotyczy łańcuchów spinowych, możliwych opisywać oddziaływania pomiędzy spinami w łańcuchu i kończy się wyczerpującym przeglądem ostatnich badań. Zagadnienia wybrane do omówienia zostały dobrze, szerzej niż sama tematyka badań prezentowana w rozdziale czwartym, ale autor nie uniknął pewnych błędów.

Najbardziej znaczącym z nich jest błędne definiowanie pojęć dodatniości i kompletnej dodatniości. Odnoszą się one nie do operatorów na przestrzeniach Hilberta, ale do odwzorowań pomiędzy przestrzeniami operatorów. W definicji na stronie 26, nieujemność wszystkich wartości własnych to dodatnia półokreśloność operatora, a iloczyn tensorowy identyczności z operatorem dodatnio półokreślonym zawsze da operator dodatnio półokreślony. Z podobnym pomyleniem pojęć spotykamy się na stronie 30, gdzie blokowa dodatni operator (świadek splątania) nazywany jest odwzorowaniem. Dalej, na tej samej stronie dodatniość odwzorowania definiuje się błędnie jako dodatnią półokreśloność operatora. Dopiero na stronie 35 słowo odwzorowanie (map) przypisywane jest do właściwych obiektów. Na poprawną definicję odwzorowania kompletnie dodatniego czytelnik musi poczekać do wzoru 2.33, gdzie jest ono definiowane nie poprzez własności, które musi spełniać, ale poprzez postać Kraussa (Stinespringa). Brak zrozumienia dziedziny i przeciwdziedziny operatora kompletnie dodatniego pojawia się ponownie na stronie 44 w definicji półgrupy dynamicznej. Elementy półgrupy przestają być nazywane odwzorowaniami, a zaczyna się o nich pisać jako o operatorach i ponowiona jest nieprawidłowa definicja kompletnej dodatniości.

Podobnego rodzaju błędem jest nazywanie wektorów stanów stanami. Na stronie 15 mamy: *For every physical state of the system, there exists a vector $|\psi\rangle$ (state vector) that represents this state.*

co jest prawdą tylko dla stanów czystych, a nie wszystkich stanów fizycznych. Podobnie na stronie 19, autor wprowadza rozróżnienie pomiędzy stanami czystymi i splątanymi, ale naprawdę opisuje różnice pomiędzy wektorami produktowymi i nieproduktowymi w przestrzeni Hilberta (co dopiero definiuje separowalność lub splątanie odpowiadającego im stanu czystego). Stany mieszane pojawiają się dopiero w podrozdziale 1.5 jako stany wielu kopii stanu, z których każda kopia jest w innym stanie czystym, co jest nie do końca prawdą, bo nawet pojedyncza kopia stanu może być w stanie mieszanym (jeżeli np. jest splątana z innym układem). Moim zdaniem autor wpadł w pułapkę rozważań interpretacyjnych.

W podrozdziale 1.1 mamy sformułowanie:

To fully characterize the action of an operator, one has to formulate it with

respect to some basis in the space

- w miejsce *one has* bezpieczniej byłoby napisać *it is enough* - np. operatory pochodnej i całki definiujemy nie poprzez określenie ich działania na wektorach bazowych. Oczywiście pomyłką jest z kolei użycie *mixed systems* w miejsce *composite systems*.

W podrozdziale 1.2, na stronie 20 użyto niefortunnej konwencji zaznaczania do której przestrzeni Hilberta należą kolejne czynniki iloczynu tensorowego. Lepiej było napisać na końcu linii, po przecinku $|\psi_i\rangle \in \mathcal{H}_i$. Dalej na tej samej stronie oznaczono wyniki pomiaru stanu Bella jako wektory produktowe w przestrzeni Hilberta i użyto sformułowania, że pomiar zwraca stany. Należało raczej powiedzieć, że taki będzie stan układu po pomiarze (pomiar zwraca etykietę powiązaną z projektorem).

Dodatkowo w rozdziale 1.6 dotyczącym świadków splątania mamy:

If this operator acts on the entangled state, the result will yield a negative value. Therefore, the measurement gives a clear answer as to whether the examined state is separable or entangled [28, 29]

co jest nieprawdą - pojedynczy świadek splątania nie wykrywa każdego stanu splątanego.

W podrozdziale 1.3 wprowadzającym do nierówności Bella, błędnie przypisywana jest Bellowi nierówność CHSH. Bell udowydniał twierdzenie Bella na innej nierówności. Następnie znaleziono wiele innych nierówności pomiędzy wartościami oczekiwanymi zmiennych losowych, które muszą zachodzić przy założeniu istnienia przestrzeni probabilistycznej (zmiennych ukrytych), ale są łamane na stanach splątanych w mechanice kwantowej. Nierówność CHSH jest prosta, eksperymentalnie weryfikowalna i przez to najpopularniejsza, ale nie jest to oryginalna nierówność rozważana przez J.S.Bella. Dalej:

However, if one assumes that the local hidden variables do not exist, and the result of the measurement depends only on the axes choice, it is sufficient to find a set of axes, for which the Bell's inequality will not be satisfied

- braku istnienia zmiennych ukrytych nie zakłada się - otrzymuje się go jako wynik łamania nierówności Bella, która jest wyprowadzana przy założeniu ich istnienia. Wreszcie pod koniec rozdziału mamy:

Their results clearly proved the correctness of the quantum theory formulations - with all its non-locality and nondeterminism - and disproved the hypothesis of local hidden variables [2]

jest to prawda, ale wcześnie eksperymenty miały jeszcze lukę wynikającą z niedoskonałości detektorów fotonowych. Zamiana pomiarów projektywnych na pomiary uogólnione uwzględniające szum detektorów czyni wyniki pomiarów niesprzeczne z modelem zmiennych ukrytych.

Eksperymentalny pomiar nierówności Bella pozbawiony tej luki został wykonany całkiem niedawno. We wzorze na korelator w nierówności Bella, jednostkowe wektory kierunkowe powinny być mnożone skalarnie przez wektory o wyrazach operatorowych - rozumiem, że jest to tylko pomyłka.

W podrozdziale 1.4 rozkład Schmidta jest błędnie wyprowadzany. Macierz współczynników stanu układu złożonego z dwóch podukładów nie musi być macierzą symetryczną, jeżeli układy są rozróżnialne, a na pewno nie dodatnio półokreśloną, a tylko w takim przypadku rozkład własny pokrywa się z rozkładem singularnym, z którego wyprowadza się rozkład Schmidta.

W podrozdziale 1.5, w definicji względnej entropii splątania minimalizujemy entropię względną dwóch danego stanu i stanu separowalnego. Wbrew temu co pisze autor, splątania stanów nie wyznaczamy z kryterium Peresa-Horodeckiego, co byłoby niemożliwe poza wymiarami podukładów 2×2 i 2×3 , ale po prostu minimalizujemy po nich, korzystając z ich łatwej parametryzacji. Dodatkowo, na początku rozdziału nie rozumiem, dlaczego iloczyn tensorowy jest nazywany iloczynem Kroneckera (co jest nazwą poprawną, ale współistnienie jest niepotrzebne).

W podrozdziale 1.6 mamy: *all the possible measurements are represented by hermitian operators (observables)* co jest prawdą, po doprecyzowaniu że chodzi o pomiary projektywne o wartościach rzeczywistych.

Nie widzę dobrego uzasadnienia dla podrozdziałów 1.7 i 1.9. W podrozdziale 1.7 autor wprowadza miary splątania: Lokalna Kwantowa Nieoznaczoność i Lokalna Kwantowa Informacja Fishera. Nie widzę dobrego uzasadnienia dla tych podrozdziałów. Miary te nie są nigdzie używane w dalszej części pracy. Rozdział 1.9 wprowadza inną miarę nieklasyczności (określającą jako nieklasyczne również niektóre stany separowalne) - Kwantowy Dyskord.

Podrozdział 1.7: QFI definiowane wzorem 1.31 różni się od wzoru (17) definiującego QFI jako wartość oczekiwaną kwadratu symetrycznej pochodnej logarytmicznej w [36]. Skąd wynika różnica? Po prawej stronie równania definiującego symetryczną pochodną logarytmiczną powinniśmy mieć antykomutator zamiast komutatora.

Podrozdział 19: Definiując $S(\rho_B|\rho_A) = S(\rho_{AB}) - S(\rho_A)$, oba równania w (1.36) dają to samo, a równanie (1.37) daje 0. Co więcej, wszystkie entropie vN są niezależne od wyboru bazy. Zależność od bazy pojawi się przy prawidłowej definicji $S(\rho_B|\rho_A)$. Bardzo intrygująca jest też pojawiająca się na stronie 36 koncepcja bazy własnej przestrzeni Hilberta.

Na stronie 39 uzasadnieniem hermitowskości operatora jest to, że został zdefiniowany jako generator jednoparametrowej podgrupy grupy unitarnej. W wyprowadzeniu równania Milburna $\theta(\tau)$ nazywane jest fazą, ale ma wymiar czasu. Ogólną zarzutem do całej pracy jest niepisanie wprost stałej $\hbar$. Jej pozostawienie ułatwia rozumienie sensu fizycznego równania.

Na stronie 40 pada sformułowanie:

However, from the mathematical point of view, it is easy to see that both unitary and Milburn time evolution lead finally to the eigenstate of the Hamiltonian

co jest nieprawdą - ewolucja unitarna żadnego stanu nie będącego stanem własnym nie dąży asymptotycznie do stanu własnego - byłoby to sprzeczne z zasadą zachowania energii w układzie zamkniętym.

Na stronie 47 błędnie jest tłumaczone znikanie komutatora. Nie wynika ono z produktowości stanu początkowego - stan skorelowany rozkłada się na kombinację stanów produktowych, więc również znikałby na mocy liniowości komutatora.

W podrozdziale 2.4 by uzyskać równanie bez pamięci z równania z pamięcią, jądro pamięci nie może być postaci: stała razy delta Diraca. K powinno być superoperatorem, ale nie jest to nigdzie wspomniane.

Na stronie 51 małe potknięcie - zachowanie śladu nie jest cechą pojedynczego operatora Kraussa, ale całego ich zestawu. Na stronie 55 równanie 2.49 nazywane jest podobnym do równania Lindblada, ale jest to dokładnie równanie Lindblada.

W podrozdziale 2.4.2 numeracja qubitów jest nietypowa - numerując od zera do N-1, otrzymujemy z ciągów 0 i 1 numery stanów w zapisie binarnym. Na stronie 86 już numerujemy wektory bazy od 0.

Na stronie 61 mamy sformułowanie: *Exchange interactions result equally from the Pauli exclusion principle and from the electrical repulsion of particles with the same charge*, co jest dla mnie dość zaskakujące - spin sam w sobie nie ma ładunku elektrycznego, ale jego moment magnetyczny oddziałuje z polem wytwarzanym przez inne spiny. Warto byłoby rozwinąć ten temat.

Na stronie 62 mamy problem z konwencją - nazwa macierze Pauliego jest zwyczajowo zarezerwowana dla wymiaru 2. Obiekty, dla spinu 1 nazwane w pracy macierzami Pauliego są po prostu bezwymiarowymi operatorami spinowymi. Na stronie 75 oczywiście *unitary evolution* zamiast *unitary interaction*.

Rozdział czwarty, prezentujące wyniki uzyskane przez doktoranta analizuje splątanie dwucząstkowe zredukowanego stanu termicznego łańcucha spinowego dla różnych typów oddziaływania pomiędzy spinami. Najpierw analizowane jest oddziaływanie wymienne (w symetrycznym oddziaływaniu Heisenberga, w tym również dla dalszych sąsiadów, oraz dla złamanej symetrii rotacyjnej - modele XXZ i XYZ), a następnie, po ograniczeniu się do modelu XXZ o częściowo złamanej symetrii translacyjnej analizowany jest wpływ zewnętrznego pola magnetycznego w kierunku wyroznionej osi, jednorodnego, niejednorodnego (o okresowości 2 spinów) oraz zmiennego w czasie o jednej składowej harmonicznej. W dalszej części rozważany jest wpływ oddziaływania Działożyńskiego-Moriya (jednokierunkowego i ogólnego), oddziaływania KSEA i oddziaływania trójcząstkowego (jednokierunkowego i ogólnego). W każdym przypadku, oprócz badania splątania stanu termicznego badana jest również dynamika splątania dla układu termalizującego przez oddziaływanie z rezerwuarem bozonowym. Dynamika przedstawiana jest dla stanów początkowych będących superpozycjami stanów czystych o tej samej magnetyzacji.

Autor opisuje wyniki symulacji w każdym przypadku i podsumowuje je, starając się budować pewne intuicje i jakościowe rozumienie wpływu poszczególnych oddziaływań w Hamiltonianie na dynamikę splątania i splątanie stanu końcowego. Wybraną miarą splątania dwóch spinów jest concurrence. Dla krótkich łańcuchów autor oblicza wartości własne hamiltonianu analitycznie (w przypadku oddziaływania trójcząstkowego nawet dla łańcucha trzech spinów i 8-wymiarowej przestrzeni Hilberta), z wyjątkiem kilku najbardziej ogólnych przypadków gdzie proste wyrażenia analityczne nie istnieją. Pewnym mankamentem jest używanie oznaczeń γ_N i γ_P , które są wyjaśnione dopiero w konkluzjach, a we wstępie do rozdziału czwartego współczynniki dekoherencji oznaczone są jako γ_1 i γ_2 . We wstępie do rozdziału 4 autor ogranicza się do oddziaływania z rezerwuarem jednego spinu. Czy w obliczeniach numerycznych używane jest już oddziaływanie wszystkich spinów z rezerwuarem? Następnie, autor deklaruje znalezienie elementów macierzowych superoperatora dekoherencji $\mathcal{D}_q$, ale obkłada go wektorami bazowymi przestrzeni Hilberta układu, zamiast przestrzeni operatorowej. Dopiero w równaniu (4.4) wyjaśnia się, że obkładana była wartość superoperatora na stanie ρ . Na rysunku 103 na stronie 156 dostrzegamy niemonotoniczność zachowania miary splątania w funkcji stałej sprzężenia J_X . Zachowanie to występuje tylko dla trzech spinów. Czy jest to artefakt numeryczny, czy można ten efekt zinterpretować fizycznie?

W części naukowej swojej pracy autor skupia się na analizie numerycznej i opisuje jej wnioski. Rozprawa byłaby na pewno ciekawsza, gdyby autor zawarł w niej wyniki swoich badań z pracy *A Maple package for combinatorial aspects of Bethe Ansatz* i opisał problemy implementacyjne równania Lindblada.

Podsumowując, stwierdzam »e przedstawiona mi do oceny rozprawa doktorska pana mgr inż. Michała Kaczora spełnia wszelkie, tak ustawowe (określone w art. 187 ust. 1-3 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz.U. z 2024 r., poz. 1571 ze zm.)), jak i zwyczajowe wymogi stawiane rozprawom doktorskim i wnioskuję o dopuszczenie Kandydata do dalszych etapów postępowania w sprawie nadania stopnia naukowego doktora.

Gniewomir Sarbicki