

Recenzja pracy doktorskiej mgra Ricardo Ravell Rodríguez'a

„Different levels of approximations in Open Quantum Systems and their applications”

Praca doktorska mgra Ricardo Ravell Rodríguez'a z nadmiarem spełnia ustawowe i zwyczajowe wymogi stawiane pracom doktorskim. Problemy postawione przez doktoranta uważam za bardzo ambitne, a uzyskane wyniki dowodzą, że doktorant posiada gruntowną wiedzę teoretyczną oraz znakomity warsztat badawczy.

Wyznaczanie dynamiki układu kwantowego oddziałującego z otoczeniem jest na ogół niezwykle wymagającym zadaniem. Teoretycznie znając mikroskopowy model badanego układu i otoczenia zadawany przez odpowiedni Hamiltonian wystarczy znaleźć unitarną ewolucję generowaną przez pełen Hamiltonian układu + otoczenie, a następnie dokonać częściowego śladu względem stopni swobody otoczenia. W praktyce powyższy schemat jest bardzo trudno zrealizować. Z tego powodu w teorii kwantowych układów otwartych stosuje się szereg różnych przybliżeń, które ułatwiają wyznaczenie ewolucji samego układu. Należy podkreślić, że stosowanie przybliżeń jest tutaj sprawą niezwykle delikatną ponieważ nieodpowiednio zastosowane przybliżenie może zaburzyć matematyczne własności kwantowej ewolucji, która jest reprezentowana przez kompletnie dodatnie odwzorowania dynamiczne zachowujące ślad. Najbardziej powszechnym przybliżeniem jest tzw. granica słabego oddziaływania (weak coupling limit), która jak pokazał Davies prowadzi do kwantowej półgrupy dynamicznej. Własności odpowiedniego generatora ewolucji zostały w pełni scharakteryzowane w pracach Goriniego, Kossakowskiego, Sudarschana i Lindblada w latach 70. XX wieku (tzw. generatory GKLS). Ewolucja opisywana przez półgrupę dynamiczną nie zawsze dobrze opisuje prawdziwą (tzn. bez wprowadzania przybliżeń) dynamikę układu. Praca doktorska mgra Ricardo Ravell Rodríguez'a poświęcona jest analizie różnych przybliżeń w teorii kwantowych układów otwartych i ich wpływie na opis dynamiki układu kwantowego. Tym samym wpisuje się w ważny nurt badań niezwykle istotny dla modelowania i kontroli układów kwantowych.

Praca poza wprowadzeniem i podsumowaniem jest podzielona na cztery zasadnicze rozdziały. W rozdziale 2 Autor wyprowadza markowowskie równanie GKLS i detalicznie analizuje wszystkie przybliżenia zaangażowane w tym procesie. Etapem pośrednim jest równanie Blocha-Redfielda, które nie prowadzi do kompletnie dodatniej ewolucji. Co więcej, zazwyczaj nie gwarantuje nawet tego, że ewolucja zachowuje dodatniość operatora gęstości układu, tzn. pewne stany początkowe prowadzą do niefizycznej ewolucji. Natomiast w przypadku, gdy początkowa macierz początkowy zachowuje dodatniość w czasie ewolucji, to taka dynamika

zazwyczaj lepiej przybliży prawdziwą dynamikę układu. Dopiero uśrednienie ergodyczne (znane również jako przybliżenie rotującej fali) sprowadza równanie Blocha-Redfielda do równania GKLS opisującego kompletnie dodatnią markowską półgrupę dynamiczną. Cała analiza pokazuje, że nierozważne stosowanie przybliżeń może prowadzić do istotnych problemów. Autor przedstawia bardzo ciekawe porównanie tzw. podejścia globalnego i lokalnego do równania GKLS w przypadku występowania degeneracji poziomów energetycznych, które pokazuje w jakich sytuacjach stosować opis globalny, a w jakich lokalny. Nieodpowiedni wybór może np. prowadzić do łamania drugiej zasady termodynamiki. Autor dyskutuje również przybliżenie wprowadzone przez Alickiego w latach 80. prowadzące do kompletnie dodatniego odwzorowania dynamicznego, które nie jest opisywane równaniem GKLS. Podejście to zostało ponownie analizowane przez Rivasę i nazwane jako "refined weak coupling limit". Przybliżenie to odtwarza generator GKLS w granicy dużych czasów, natomiast dla krótkich czasów na ogół lepiej opisuje prawdziwą dynamikę niż markowskie równanie GKLS. W kolejnych rozdziałach pracy Autor rozważa stosowanie wspomnianych wyżej przybliżeń w konkretnych sytuacjach fizycznych. W szczególności Autor wnikliwie analizuje markowski i niemarkowski proces ładowania kwantowej baterii.

Rozdział 3 zawiera analizę procesu ładowania baterii kwantowej. Proces ten jest modelowany dynamiką markowską z generatorem GKLS. Zadanie polega na modelowaniu ewolucji stanu początkowego (zazwyczaj stan podstawowego baterii) do stanu końcowego, który odpowiada naładowanej baterii. Autor używa tzw. protokołu Krotova, który jest dobrze znany w teorii optymalnego sterowania. Protokół ten pozwala na realizację procesu ładowania przy ograniczonych zasobach energii. Po pobieżnym wyjaśnieniu zasadniczych kroków protokołu Krotova Autor stosuje ten protokół do odpowiedniego modelu fizycznego zadanego równaniami (3.12)-(3.14). Proces ładowania jest optymalizowany względem zależnego od czasu pola kontrolnego. Dodatkowo oprócz ergotropii i energii zużytej w procesie ładowania Autor wyznacza skuteczność procesu (formuły (3.16)-(3.17)). W analizowanym modelu Hamiltonian jest kwadratowy w operatorach kreacji i anihilacji co pozwala przeprowadzić pełną analizę dla stanów Gaussowskich. Analiza porównawcza z wynikami uzyskanymi wcześniej w pracy [FAM+18] została zaprezentowana graficznie. Analiza pokazuje, że optymalizacja procesu ładowania baterii prowadzi w szczególności do wyższej ergotropii, która charakteryzuje część zgromadzonej energii, która może być wykorzystana na pracę.

Rozdział 4 analizuje proces ładowania baterii kwantowej w schemacie niemarkowskim. Autor przeprowadza analizę porównawczą opisu markowskiego w schematach lokalnym i globalnym oraz opisu opartego na "refined weak coupling limit". Ponieważ podejście lokalne zostało wcześniej zbadane w pracy [FAM+18] Autor przeprowadza analizę podejścia globalnego, a następnie pracowicie przeprowadza detaliczną analizę w przybliżeniu "refined weak coupling limit". Przeprowadzona analiza pokazuje, że podejście lokalne całkowicie zawodzi w granicy dużych czasów. Istotnie, dla temperatury otoczenia $T=0$ energia baterii asymptotycznie rozbiega do nieskończoności gdy sprzężenie z baterią zanika do zera. Autor pokazuje, że problem ten znika w podejściu globalnym. Wniosek generalny z przeprowadzonej analizy jest taki, że podejście lokalne zawodzi w granicy długich czasów bez względu na wielkość stałej sprzężenia "g" między baterią a układem ładującym. Natomiast gdy stała sprzężenia rośnie, podejście lokalne prowadzi do stanu stacjonarnego zgodnego z podejściem globalnym i niemarkowskim "refined weak coupling limit". Te dwa ostatnie dają, jak wiadomo, ten sam stan stacjonarny. Analiza Autora pokazuje również, że termalizacja do stanu stacjonarnego następuje szybciej w procesie markowskim niż niemarkowskim, tzn. opisywanym przez "refined weak coupling limit". Kolejny bardzo ciekawy wynik zaprezentowany w tym rozdziale to

markowskie przybliżenie próżniowe (Markovian-vacuum approximation). Przybliżenie to zakłada, że w granicy długich czasów populacja stanu wzbudzonego kubitu oddziałującego z bozonowym otoczeniem zanika eksponencjalnie. Autor przedstawia zasadnicze elementy tego przybliżenia i następnie stosuje je do znanego modelu Fredrichsa-Lee. Analiza jest poprawnie przeprowadzona. Mam jedynie pewną wątpliwość do formuły (4.79). Ponieważ operator H_{0r} nie jest Hermitowski, czy z prawej strony nie powinien występować ze sprzężeniem Hermitowskim? Doktorant stosuje diskutowane przybliżenie w przypadku gdy pole bozonowe jest w stanie próżni oraz w stanie koherentnym. W obu przypadkach dostaje podobne równanie dynamiki kubitu opisujące dysypację energii. Jedyna różnica polega na tym, że w przypadku stanu koherentnego efektywny Hamiltonian kubitu jest zależny od czasu.

Rozdział 5 zawiera dyskusję tzw. modelu rezonansowego (resonant level model) opisującego oddziaływanie fermionu z kąpielą fermionową. Autor dodatkowo zakłada Lorenzowską gęstość spektralną, co pozwala w granicy gdy szerokość rozkładu zmierza do nieskończoności dostać stałą gęstość Γ . W tej granicy zostaje wyprowadzone markowskie równanie kinetyczne na obsadzenie stanu wzbudzonego. Asymptotyczne obsadzenie nie zależy od Γ co oczywiście nie jest prawdą dla rzeczywistej ewolucji. Natomiast w granicy słabego oddziaływania (mała Γ) znaleziona ewolucja doskonale odtwarza rzeczywistość. W dalszej części Autor stosując narzędzia kwantowej teorii estymacji (informacja Fishera, ograniczenie Cramera-Rao) analizuje wyznaczenie temperatury układu. Dokonując pomiaru w bazie własnej operatora liczby obsadzeń Doktorant znajduje formułę na informację Fishera w języku zależnego od temperatury obsadzenia stanu wzbudzonego. Przeprowadzona analiza numeryczna wyznacza błąd względny $\Delta T/T$. Dla temperatury małej (w porównaniu do energii stanu wzbudzonego) błąd względny dla rzeczywistej ewolucji znacznie odbiega od błędu wyznaczonego w przybliżeniu markowskim. Natomiast wraz ze wzrostem temperatury błąd rzeczywisty jest bliski temu w przybliżeniu markowskim.

Praca jest napisana w języku angielskim. Struktura pracy jest poprawna. Prezentacja materiału jest koherentna. Doktorant zamieszcza detaliczne wyprowadzenia większości formuł. Znalazłem jedynie kilka usterek, które nie wpływają na moją końcową ocenę pracy:

- stan pasywny (passive state) poniżej (3.1) jest niepoprawnie definiowany,
- powyżej (4.67) Autor odsyła czytelnika do (***) w pracy [WMHA21]. Może lepszym rozwiązaniem byłby dodatek/uzupełnienie to pracy.
- kilka literówek, np. poniżej (4.167) w nazwisku Schroedingera (chciałem pokazać, że przeczytałem dokładnie całą pracę).
- między (5.1) i (5.2) powinno być b_k zamiast operatora „a” w antykomutatorze.
- co prawda Autor zaznacza, że zmienia notację gęstości spektralnej z J na Γ , to jednak jest to w czytaniu dość uciążliwe.
- poniżej (5.14) Autor pisze (see maybe some references about not having this). Jak rozumiem jest to komentarz dla niego samego.
- cytowanie Borna [Bor55] i [Max26] uważam za lekką przesadę. Czemu Autor w takim razie nie cytuje prac Schroedingera? Dodatkowo w tytule pracy Borna są błędy edytorskie.
- referencja [mar] nie została wprowadzona.
- autorem pozycji [LP00] jest jedynie Rodney Loudon (Doktorant dodaje drugiego autora F. Petruccione).
- generalnie referencje są zrobione dość niestarannie (niektórzy autorzy mają pełne imiona, niektórzy tylko inicjały).

Ocena końcowa: Pracę doktorską mgra Ricardo Ravell Rodríguez'a oceniam bardzo wysoko. Uważam, że z nadmiarem spełnia ustawowe i zwyczajowe wymogi stawiane pracom doktorskim. Doktorant postawił szereg ambitnych problemów i uzyskał bardzo ciekawe rezultaty. Bardzo wysoko oceniam analizę przeprowadzoną w przybliżeniu „refined coupling limit”. W tym przybliżeniu ewolucja jest niemarkowska i cała analiza jest znacznie bardziej wymagająca. Warto podkreślić, że w przypadku procesu ładowania kwantowej baterii taka niemarkowska ewolucja interpoluje między ewolucją markowską w schemacie lokalnym (krótkie czasy) i globalnym (długie czasy). Przedstawione wyniki zostały częściowo opublikowane w Phys. Phys. A. Pozostałe wyniki zostały opublikowane w formie eprintów w bazie arXiv. Z pełnym przekonaniem wnoszę o dopuszczenie pana mgra Ricardo Ravell Rodríguez'a do dalszego etapu przewodu doktorskiego.

prof. dr hab. Dariusz Chruściński