

W kierunku ultrazimnych cząsteczek zawierających atomy metali przejściowych lantanowców: oddziaływania międzyatomowe i ultrazimne zderzenia

Klaudia Zaremba-Kopczyk

Ostatnie trzy dekady dynamicznego rozwoju technik laserowego chłodzenia i pułapkowania atomów umożliwiły produkcję ultrazimnej kwantowej materii, która może być z ogromną precyzją kontrolowana i mierzona. Ultrazimne atomy i cząsteczki tworzą doskonałą platformę do badania nowych zjawisk kwantowych i znalazły swoje zastosowanie w takich obszarach badań jak fizyka materii skondensowanej, obliczenia kwantowe, kontrolowana chemia, czy precyzyjne testy fundamentalnych praw fizyki.

W ostatnich latach uwagę badaczy przyciągnęły tzw. ultrazimne gazy dipolowe, w których atomy lub cząsteczki wykazują silne oddziaływania dipol-dipol – takie ultrazimne gazy mogą tworzyć zarówno wysokomagnetyczne atomy, jak i polarne cząsteczki. Ultrazimne kwantowe mieszaniny zawierające atomy metali przejściowych lub lantanowców oferują perspektywy utworzenia polarnych cząsteczek posiadających zarówno duży elektryczny, jak i magnetyczny moment dipolowy. Obecne w takich mieszaninach połączenie dalekozasięgowych oddziaływań o elektrycznym i magnetycznym charakterze pozwoli na stworzenie nowych symulatorów kwantowych i obserwację egzotycznych faz kwantowych, natomiast złożona struktura elektronowa takich cząsteczek mogłaby zostać wykorzystana w precyzyjnych pomiarach stałych fundamentalnych.

Niniejsza rozprawa doktorska przedstawia teoretyczne badania międzyatomowych oddziaływań i zderzeń w ultrazimnych mieszaninach zawierających atomy metali przejściowych (takich jak Cr, Zn, Cd) i lantanowców (takich jak Eu, Dy, Er) oraz analizuje perspektywy tworzenia ultrazimnych dwuatomowych cząsteczek zawierających te atomy. Prezentowane badania obejmują obliczenia potencjałów oddziaływania metodami *ab initio* chemii kwantowej oraz obliczenia rozpraszania kwantowego dla ultrazimnych zderzeń atom-atom w zewnętrznym polu magnetycznym.

Praca podzielona jest na cztery główne części. Pierwsza część stanowi wprowadzenie do ultrazimnej materii i przedstawia aktualny stan badań nad ultrazimnymi cząsteczkami i dipolowymi gazami kwantowymi. W drugiej części przedstawiono podstawy teoretyczne i metody badawcze zastosowane w celu uzyskania wyników przedstawionych w trzeciej, głównej części rozprawy. Trzecią część rozprawy stanowi seria powiązanych tematycznie publikacji i przedruków poświęconych badaniom oddziaływań i zderzeń międzyatomowych w ultrazimnych mieszaninach zawierających atomy metali przejściowych i lantanowców. W prezentowanych publikacjach i przeddrukach poruszane są następujące problemy badawcze: zderzenia atom-atom w ultrazimnych gazach kwantowych atomów europu i ultrazimnych mieszaninach europu i metali alkalicznych (Li, Rb), struktura elektronowa cząsteczek van der Waalsa składających się z atomu cynku lub kadmu oddziałującego z atomem metalu alkalicznego (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr) lub metalu ziem alkalicznych (Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra), struktura elektronowa cząsteczki LiCr i zderzenia atom-atom w ultrazimnych mieszaninach chromu i litu, a także oddziaływania dalekozasięgowe w ultrazimnych mieszaninach atomów dysprozu lub erbu z atomami metali alkalicznych (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr) lub metali ziem alkalicznych (Be, Mg, Ca, Sr, Ba). Ostatnia, czwarta część pracy zawiera krótkie podsumowanie uzyskanych wyników oraz rysuje perspektywy dalszych badań.