



**POLITECHNIKA
GDAŃSKA**

WYDZIAŁ FIZYKI TECHNICZNEJ
I MATEMATYKI STOSOWANEJ

Prof. dr hab. Józef Eugeniusz Sienkiewicz
Zakład Fizyki Teoretycznej i Informatyki Kwantowej
Tel. +58 347 22 25
E-mail: jozef.sienkiewicz@pg.edu.pl

Gdańsk, dn. 5 października 2023 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Klaudii Kingi Zaremby-Kopczyk

**pt. Towards Ultracold Molecules Containing Transition-Metal and
Lanthanide Atoms: Interatomic Interactions and Ultracold Collisions**

zrealizowanej na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego
pod kierunkiem promotora dr. hab. Michała Tomzy, prof. UW

Prezentowana rozprawa doktorska zawiera badania oddziaływań międzyatomowych i zderzeń w ultrazimnych mieszaninach zawierających wybrane atomy metali przejściowych i wybrane atomy lantanowców oraz przedstawia wyniki badań dotyczące warunków tworzenia ultrazimnych cząsteczek dwuatomowych zawierających te atomy. Rozprawa jest oparta na cyklu czterech tematycznie spójnych artykułów, przy czym dwa z nich już zostały opublikowane, a następne dwa są przedstawione w postaci preprintów. We wszystkich artykułach doktorantka jest pierwszą autorką. Jej główny wkład polegał przede wszystkim na wykonaniu obliczeń numerycznych, na udziale w analizie i interpretacji otrzymanych wyników, wykonaniu tabel i rysunków oraz pisaniu pierwszych wersji artykułów.

Kandydatka jasno zdefiniowała tezy swojej rozprawy, które zawierają obliczenia potencjałów oddziaływania przy użyciu metod chemii kwantowej oraz obliczenia rozpraszania kwantowego dla ultrazimnych zderzeń atom-atom w zewnętrznych polach magnetycznych.

Tematyka rozprawy bardzo dobrze wpisuje się w obecnie prowadzone intensywne badania użycia atomów o wysokim momencie dipolowym do tworzenia ultrazimnych cząsteczek dwuatomowych. W szczególności zwrócono tutaj uwagę na zderzenia z udziałem atomów europu i metali alkalicznych jako kolejnych kandydatów do tworzenia ultrazimnych gazów cząsteczkowych. Te cząsteczki, ze względu na ich mniej skomplikowaną strukturę mogą, przy wykorzystaniu magnetycznych rezonansów Feshbacha, prowadzić do precyzyjnej kontroli wewnętrznych stopni

swobody. To odgrywa zasadniczą rolę w chłodzeniu laserowym i pułapkowaniu. Również w tym celu zostały przeprowadzone bardzo dokładne obliczenia oddziaływania atomów cynku i kadmu z poszczególnymi atomami metali alkalicznych i metali ziem alkalicznych oraz atomu litu z atomem chromu.

Postępy w technikach chłodzenia i pułapkowania atomów w ostatnich latach umożliwiły osiągnięcie ultraniskich temperatur atomów o coraz bardziej skomplikowanej strukturze wewnętrznej. Znaczący postęp został osiągnięty w tworzeniu ultrazimnych próbek silnie magnetycznych atomów metali przejściowych lub lantanowców, takich jak Cr, Dy, Er i Eu. Ostatnio ultrazimne mieszaniny takich atomów z atomami metali alkalicznych, w tym Cr + Li, stały się przedmiotem intensywnych badań doświadczalnych.

W pierwszej pracy wchodzącej w skład spójnego cyklu publikacji ("Magnetically tunable Feshbach resonances in ultracold gases of europium atoms and mixtures of europium and alkali-metal atoms", Klaudia Zaremba-Kopczyk, Piotr S. Żuchowski, and Michał Tomza, Phys. Rev. A 98, 032704 (2018)) doktorantka wykonała wszystkie obliczenia numeryczne dla ultrazimnych cząsteczek zawierających europ, wzięła udział w analizie i interpretacji wyników oraz przygotowała wszystkie rysunki i tabele. W tej pracy, przy użyciu wielokanałowych obliczeń rozpraszania kwantowego zbadano magnetycznie dostrojone rezonanse Feshbacha między ultrazimnymi atomami europu oraz między atomami europu i atomami alkalicznymi. Zbadano zarówno systemy jednojądrowe $^{153}\text{Eu} + ^{153}\text{Eu}$, jak i heterojądrowe $^{151}\text{Eu} + ^{153}\text{Eu}$ oraz systemy $^{153}\text{Eu} + ^{87}\text{Rb}$ i $^{153}\text{Eu} + ^7\text{Li}$. Przeanalizowano możliwości kontroli procesu rozpraszania z uwzględnieniem chaotycznego zachowania kwantowego. Zwrócono uwagę na możliwość zastosowania magnetoasocjacji w ultrazimnych cząsteczkach polarnych i paramagnetycznych. Szczegółowo określono magnetyczne rezonanse dla wszystkich badanych kombinacji atomowych. Zauważono, że gęstość rezonansów zależy mocno od rzutu całkowitego momentu pędu na pole magnetyczne. Również podkreślono, że rezonanse fali s są bardziej korzystne niż rezonanse fali d ponieważ oddziaływanie dipol-dipol między atomami europu i atomami alkalicznymi jest słabsze niż oddziaływanie związane z wymianą spinu. Z kolei oddziaływanie dipol-dipol między atomami europu jest porównywalne z oddziaływaniem wymiany spinu.

W drugiej pracy ("Van der Waals molecules consisting of a zinc or cadmium atom interacting with an alkali-metal or alkaline-earth-metal atom", Klaudia Zaremba-Kopczyk and Michał Tomza, Phys. Rev. A 104, 042816 (2021)) doktorantka wykonała wszystkie obliczenia numeryczne, wzięła udział w analizie i interpretacji wyników, przygotowała wszystkie rysunki i tabele, napisała pierwszą wersję artykułu oraz redagowała jego kolejne wersje. W tym artykule zbadano cząsteczki dwuatomowe składające się z atomu cynku lub kadmu i atomu metalu alkalicznego lub atomu metalu ziem alkalicznych. Takie cząsteczki są potencjalnymi kandydatami do eksperymentów z fizyki i chemii w ultraniskich temperaturach, począwszy od kontrolowanych reakcji chemicznych po bardzo dokładne fizyczne pomiary. W celu dostarczenia odpowiednich danych przeprowadzono obliczenia typu *ab initio* krzywych energii potencjalnej, stałych momentów dipolowych oraz stałych spektroskopowych podstawowych stanów elektronowych. Dzięki temu ustalono, że badane cząsteczki w podstawowym stanie elektronowym tworzą słabo związane kompleksy van der Waalsa o małych stałych momentach dipolowych i to pomimo tego, że atomy

Zn i Cd mają elektroujemności znacznie większe niż atomy metali alkalicznych i atomy metali ziem alkalicznych.

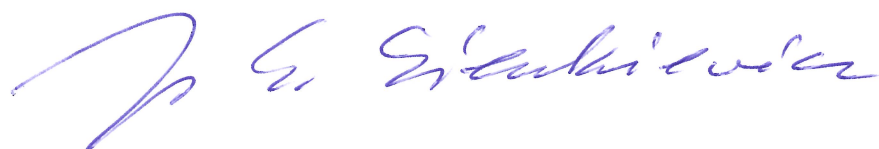
W trzeciej pracy ("Ultracold mixtures of Cr and Li atoms: theoretical prospects for controlled atomic collisions, LiCr molecule formation, and molecular precision measurements", Klaudia Zaremba-Kopczyk, Marcin Gronowski, and Michał Tomza, Preprint (2023)) doktorantka wykonała obliczenia krzywych energii potencjalnej, stałych i przejściowych momentów dipolowych, stałych struktury nadsubtelnej zarówno dla atomów litu i chromu, jak i cząsteczki LiCr, obliczyła dla dwóch stanów elektronowych zależność energii drgań od stosunku masy protonu do masy elektronu. Doktorantka również podała długości rozpraszania dla zderzeń rozpatrywanych atomów w funkcji przyłożonego pola magnetycznego. Prócz tego napisała pierwszą wersję artykułu. Dostarczenie tego wyczerpującego teoretycznego badania oddziaływań i ultrazimnych zderzeń między atomami chromu i litu może przyczynić do owocnej współpracy z doświadczalną grupą M. Zaccantiego. Zaawansowane metody obliczeniowe wykazały, że stan podstawowy cząsteczki LiCr jest stabilny i posiada duży stały moment dipolowy. Z kolei pierwszy wzbudzony stan elektronowy jest słabo związany, o mniejszej głębokości i mniejszym stałym momencie dipolowym. Przeprowadzono analizę procesu fotoasocjacji i adiabaticznie stymulowanego przejścia ramanowskiego (STIRAP) w celu zbadania doświadczalnych możliwości otrzymania ultrazimnych cząsteczek LiCr. Interującym aspektem jest zaproponowanie pomiarów stosunku masy elektronu do protonu przy użyciu tych ultrazimnych cząsteczek

W ostatniej czwartej pracy z tego cyklu ("Van der Waals coefficients for interactions of dysprosium and erbium atoms with alkali-metal and alkaline-earth-metal atoms", Klaudia Zaremba-Kopczyk, Michał Tomza, and Maxence Lepers, Preprint (2023)) kandydatka napisała program komputerowy na obliczanie współczynników C_6 , dokonała odpowiednich obliczeń i napisała pierwszą wersję artykułu. W tym artykule zaprezentowano analityczne wyrażenia dla izotropowych i anizotropowych współczynników van der Waalsa C_6 . Wyprowadzone wzory zastosowano do obliczenia współczynników C_6 dla całego szeregu cząsteczek dwuatomowych, w których poszczególne atomy znajdują się w różnych stanach elektronowych. Współczynniki van der Waalsa są niezbędne do modelowania zderzeń silnie magnetycznych atomów dysprozu lub erbu oraz atomów metali alkalicznych lub metali ziem alkalicznych.

Zawarte w rozprawie doktorskiej mgr Zaremba-Kopczyk teoretyczne badania i wyciągnięte z nich wnioski dostarczają cennych wskazówek odnoszących się do bieżących badań doświadczalnych nad wybranymi ultrazimnymi i silnie oddziałującymi cząsteczkami dwuatomowymi. W związku z szybkim rozwojem badań w dziedzinie gazów kwantowych o znaczących właściwościach dipolowych, obecne wyniki mogą być bardzo przydatne w opisie procesów zderzeniowych prowadzących do powstawania ultrazimnej materii.

Przedstawiona rozprawa doktorska stanowi znaczący wkład w fizykę molekularną, w zakresie wytwarzania zimnej i ultrazimnej materii. Kandydatka wykazała się bardzo dobrym zrozumieniem tematu i skutecznie uczestniczyła w przeprowadzaniu zaawansowanych obliczeń i opracowaniu otrzymanych wyników. Stwierdzam, że przedstawiona rozprawa doktorska spełnia wszystkie zwyczajowe i określone prawem wymagania stawiane kandydatom do stopnia

naukowego doktora nauk fizycznych i wnoszę o dopuszczenie mgr Klaudii Kingi Zaremby-Kopczyk do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Jednocześnie wnioskuję o przyznanie wyróżnienia tej rozprawie doktorskiej z powodu jej dużej wagi naukowej.

A handwritten signature in blue ink, appearing to read "P. G. Sienkiewicz". The signature is fluid and cursive, with a large initial "P" and "G".