

Prof. dr hab. Mariusz Gajda

Instytut Fizyki PAN

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Michała Krycha zatytułowanej

**Modelowanie dynamiki zderzeń atomów, jonów i cząsteczek w
ultraniskich temperaturach**

Rozprawa doktorska mgr. Michała Krycha to połączony tematycznie zbiór pięciu problemów dotyczących zderzeń atomów, jonów i cząsteczek w ultraniskich temperaturach. Tematyka rozprawy jest niezwykle aktualna i bardzo blisko łączy się z badaniami doświadczalnymi. Problemy analizowane w rozprawie odnoszą się do realnych fizycznych sytuacji i dają ilościowy opis obserwowanych procesów a również prowadzą do ważnych, z punktu widzenia eksperymentów, przewidywań.

Rozprawa doktorska mgr. Michała Krycha jest bardzo obszerna i stanowi całościowy opis zderzeń zimnych atomów, jonów czy molekuł. I tak autor zbadał dynamikę jednowymiarowego gazu Tonksa-Girardeau z niejednorodnością wywołaną wprowadzeniem jonu do układu. Dalej, wykorzystując zaawansowane metody chemii kwantowej wyznaczył nierelatywistyczne i relatywistyczne krzywe energii potencjalnej dla dwuciałowego jonu molekularnego $(\text{BaRb})^+$. W tym przypadku wyznaczył również elastyczne i nieelastyczne przekroje czynne w szczególności przekroje czynne na przeskok spinu i przekaz ładunku. W kolejnej części pracy, wykorzystując formalizm równania master, mgr M. Krych podał opis ruchu jonu schwytanego w pułapce Paula i zanurzonego w atomowym kondensacie Bosego-Einsteina. Dwa kolejne problemy opisane w rozprawie to badanie reaktywnych zderzeń dwucząstkowych dla cząstek oddziałujących za pomocą potencjałów potęgowych oraz badanie reaktywnych zderzeń polarnych molekuł w kwazidwuwymiarowej geometrii.

Jak wynika z tego krótkiego przeglądu, rezultaty uzyskane przez mgr. Krycha, ze względu na liczbę rozwiązanych problemów (pięć różnych zagadnień), z powodzeniem mogłyby stanowić materiał dla dwóch solidnych rozpraw doktorskich.

Rozdział pierwszy rozprawy stanowi zgrabne wprowadzenie do badanych problemów. Ukazuje szeroką wiedzę autora i znajomość dotychczasowych osiągnięć, zarówno teoretycznych jak i doświadczalnych. Przedstawiony opis świadczy, że autor zna i rozumie wyzwania jakie postępowanie doświadczalne stawia

przed teoretykami pracującymi w tej dziedzinie. Ta część pracy dowodzi ważkości problemów i pytań, jakie postawił przed sobą mgr M. Krych, ukazując je w perspektywie aktualnych badań.

W rozdziale drugim mgr Michał Krych rozwiązał problem zaburzenia jednowymiarowego gazu bozonów oddziałujących potencjałem zerowego zasięgu w granicy nieskończenie silnych oddziaływań, tzw. gaz Tonksa-Girardeau. Rozważane przez autora zaburzenie miało postać potencjału delta i miało za zadanie modelować obecność jonu w układzie. Znalezione rozwiązanie jest uogólnieniem dobrze znanego problemu dwóch ciał w potencjale harmonicznym z dwuciałowym oddziaływaniem „typu delta”. W przypadku badanym przez mgr. Michała Krycha, zaburzenie dzieliło pułapkę na dwie, w ogólności różne części. Znajdując jednocząstkowe rozwiązania autor buduje wielociałową funkcję falową układu, następnie analizuje zredukowaną jednocząstkową macierz gęstości i bada spójność układu wyznaczając dominującą wartość własną tej macierzy zarówno w przestrzeni położeń jak i pędów. Autor skupia się na badaniu odpowiedzi gazu Tonksa na wprowadzenie zaburzenia. Nie jest dla mnie jasne dlaczego rozważany model odpowiada jonowi, a nie np. obcemu atomowi w gazie Tonksa. Autor nie wyjaśnia również dlaczego jon można traktować jako statyczne zaburzenie i pominąć jego dynamikę. Przecież cały rozdział czwarty poświęcony jest badaniu wpływu ultra zimnego gazu na dynamikę pojedynczego jonu.

Mgr M. Krych, analizując dynamikę jednocząstkowej macierzy gęstości po usunięciu zaburzenia, zwraca uwagę na periodyczność ewolucji. Umyka jego uwadze fakt, że niejednorodność prowadzi do dwóch solitonowych zaburzeń poruszających się z przeciwnymi prędkościami. Jest to, w moim odczuciu, swoista ciekawostka. Takie zaburzenia w fermionowym układzie były w przeszłości badane przez M. Brewczyka i K. Rzążewskiego.

Rozdział trzeci przedstawia bardzo solidnie rozwiązany problem wyznaczenia potencjałów jonu molekularnego $(\text{BaRb})^+$. Wykorzystując zaawansowane metody chemii kwantowej mgr M. Krych wyznaczył krzywe molekularne w przybliżeniu Borna-Oppenheimera, zbadał elektryczne momenty dipolowe, sprzężenia nieadiabatyczne oraz sprzężenia spin-orbita. Używając elementów macierzowych molekularnego sprzężenia spin-orbita, autor wyznaczył relatywistyczne krzywe energii potencjalnej. Następnie uzyskaną strukturę elektronową wykorzystał w obliczeniach jednokanałowych w celu wyznaczenia przekrojów czynnych opisujących zderzenia elastyczne, przeskok spinu oraz nieelastyczny radiacyjny przekaz ładunku pomiędzy jonem baru a atomem rubidu. Bardzo ważnym wynikiem tej części rozprawy jest pokazanie, że zderzenia elastyczne zdecydowanie dominują nad procesami nieelastycznymi. Wynik ten sugeruje, że sympatyczne chłodzenie jonu baru przez kontakt z ultra zimnym gazem rubidowym jest możliwe. Przedstawione ilościowe wyniki potencjałów molekularnych, różnych charakterystyk spektroskopowych oraz nierelatywistycznych i relatywistycznych współczynników długozasięgowych,

charakteryzujących asymptotykę potencjału oddziaływania jonu molekularnego $(\text{BaRb})^+$ jest również bardzo cenne.

Nie będąc ekspertem w dziedzinie metod chemii kwantowej, jestem pod dużym wrażeniem pracy, jaką wykonał mgr M. Krych w celu wyznaczenia nierelatywistycznych i relatywistycznych potencjałów molekularnych. Mgr M. Krych, będąc z wykształcenia fizykiem, musiał pokonać dużą drogę aby od podstaw zapoznać się z zaawansowanymi technikami i metodami chemii kwantowej. Ten wysiłek, podobnie jak wyniki uzyskane w rozdziale trzecim bardzo doceniam.

Nie wiem natomiast dlaczego rozdział trzeci jest zatytułowany „Dwuciałowa dynamika jonu zanurzonego w zimnym gazie atomowym”. Tytuł ten sugeruje, że autor rozważa wpływ zimnego gazu atomów na dwuciałową dynamikę jonu. Jeśli dobrze zrozumiałem, mgr M. Krych bada w tej części pracy jedynie problemy dwuciałowe. Nie uwzględnia żadnych efektów wielociałowych, więc tytuł jest mylący. Poza tym doszukałem się pewnych niestaranności w opisie. Na stronie 56 autor podaje wartości liczbowe długości rozpraszania w stanie singletowym i trypletowym. Jeśli założyć, że liczby odpowiadają długościom rozpraszania w kolejności w jakiej są wymienione w tekście, to w dwóch różnych miejscach na tej samej stronie, kolejności te są zamienione.

W rozdziale czwartym mgr Krych powraca do problemu jonu zanurzonego w ultra zimnym gazie atomowym. Jest to bardzo ciekawy z punktu widzenia zarówno teorii jak i doświadczenia układ. Z doświadczalnego punktu widzenia wymaga on bardzo skomplikowanego układu: umieszczenia w tym samym miejscu dwóch różnych pułapek: pułapki jonowej typu Paula oraz pułapki dipolowej albo magnetycznej na neutralne atomy. Doświadczenia tego typu są prowadzone w dwóch laboratoriach na świecie.

Pułapkowanie jonu odbywa się w zależnych od czasu, szybkozmiennych polach elektrycznych, co prowadzi do tzw. mikroruchu jonu i stanowi istotne ograniczenie końcowej temperatury jonu. Czasem, wbrew oczekiwaniom, oddziaływanie jonu z zimniejszym termostatem atomowym prowadzi nie do chłodzenia, lecz grzania jonu. Mgr M. Krych podał kwantowy opis dynamiki jonu w kondensacie. Znalazł obszary parametrów, gdzie oddziaływanie jonu z gazem prowadzi do grzania jonu, ale też pokazał obszar parametrów, w którym można jon chłodzić. Przejrzystość opisu problemu zyskałaby gdyby autor na wstępie podał analizę stabilności równania Mathieu, opisującego dynamikę jonu w pułapce Paula.

Pokazanie, że zanurzenie jonu w kondensacie o znacznie mniejszych temperaturach mogłoby doprowadzić do sympatycznego chłodzenia jonu jest bardzo ciekawe. W szczególności pokazanie, że używanie pułapki jonowej o

małej częstości radiowej prowadzi do mniejszych temperatur jonu uważam za ważny wynik ze względu na implikacje doświadczalne. Z drugiej strony, znacznie cieplejszy od chmury atomów jon, mógłby powodować grzanie lub straty w gazie atomowym. Nie jest dla mnie jasne dlaczego można więc zaniedbać wpływ jonu na chmurę atomową i kiedy można tak zrobić?

W rozdziale piątym mgr Michał Krych przeanalizował zderzenia elastyczne oraz reaktywne cząstek w szerokim zakresie energii: od ultra niskich do wysokich. Obliczenia przeprowadził dla sferycznych, potęgowych potencjałów oddziaływania typu $1/r^n$ obejmując w ten sposób zarówno potencjał van der Waalsa ($1/r^6$) opisujący zderzenia atom-atom jak i potencjał polaryzacyjny ($1/r^4$) opisujący zderzenia atom-jon. Autor posługiwał się formalizmem defektu kwantowego w przypadku dwóch sprzężonych kanałów. Szczególną uwagę poświęcił sytuacji, gdy poziom dysocjacji kanału wejściowego leży znacznie powyżej poziomu dysocjacji kanału strat. W takim modelu mgr M. Krych wyznaczył analitycznie zespoloną długość rozpraszania w kanale wejściowym co pozwoliło na wyznaczenie szybkości zderzeń elastycznych i nieelastycznych. Wielkości te zostały scharakteryzowane krótko zasięgowym parametrem reakcji oraz przesunięciem fazowym. Największą wartością tej części rozprawy jest uogólnienie uniwersalnego modelu, w którym zakłada się, że cząstki na małych odległościach na pewno reagują. W podejściu mgr. M. Krycha parametr reakcji y może być mniejszy niż jeden, $y < 1$. Model mgr. M. Krycha pozwala również na uwzględnienie rezonansów kształtu. Zaproponowany opis pozwala w dużym stopniu na uwolnienie się od komplikacji fizyki wielu ciał na małych odległościach. Główną zaletą modelu jest to, że przy stosunkowo ogólnych założeniach pozwala on na uzyskanie prostego ale i realistycznego opisu bardzo skomplikowanych układów. Na koniec rozdziału mgr M. Krych rozważa dwa ważne fizycznie przypadki. Wyznacza szybkość zderzeń dla potencjału van der Waalsa w szerokim zakresie energii poprzez bezpośrednie obliczenia rozproszeniowe. Dobrym testem modelu proponowanego przez mgr. M. Krycha jest też porównanie danych doświadczalnych dotyczących jonizacji Penninga argonu przez metastabilny hel. Dobra zgodność wyników doświadczalnych i przewidywań teoretycznych pokazuje użyteczność proponowanego opisu.

W rozdziale szóstym mgr M. Krych zbadał zderzenia polarnych molekuł. Oprócz oddziaływań van der Waalsa uwzględnił oddziaływania dipolowe. Dipole elektryczne molekuł są indukowane zewnętrznym polem elektrycznym. Rozważany był przypadek geometrii quazidwuwymiarowej z dipolami spolaryzowanymi prostopadle do płaszczyzny, w której znajdowały się molekuły. Taka geometria zapewnia stabilność układu, gdyż dominują wówczas oddziaływania odpychające. Autor przeanalizował zarówno zderzenie reaktywne jak i elastyczne oraz porównał szybkości tych zderzeń. Problem zależy od kilku parametrów: reaktywności, długości dipolowej oraz parametrowi ściśnięcia określającego rozmiar pułapki w kierunku prostopadłym. Dla małych reaktywności szybkości zderzeń zależą od fizyki na małych odległościach, ale wraz ze wzrostem reaktywności dążą one do granicy uniwersalnej, tak jak

należało tego oczekiwać. Najciekawszym i zachęcającym z doświadczalnego punktu widzenia wynikiem jest pokazanie, że dla stosunkowo dużych momentów dipolowych zderzenia elastyczne dominują nad zderzeniami reaktywnymi. Wynik ten pokazuje, że możliwe jest chłodzenie polarnych molekuł przez odparowanie. Ze względu na wiele przewidywań dotyczących istnienia różnych egzotycznych faz polarnych molekuł w sieciach optycznych wynik ten ma dużą wagę.

Moje uwagi budzi mało klarowny opis wyników. Miałem spory problem z odczytaniem wykresów przedstawionych w tym rozdziale np. wykres 6.5. Na wykresie tym, porównywane są różne krzywe, niektóre różniące się parametrem ściśnięcia, niektóre wielkością długości dipolowej. Prowadzi to do chaosu i nie udało o mi się zrozumieć co z czym mam porównywać.

W tym rozdziale znalazłem również sprzeczne, moim zdaniem stwierdzenia. Otóż na stronie 116 można przeczytać:

„Zatem dla silnych dipoli przeważają zderzenia reaktywne i powinno dać się ustabilizować układ i przeprowadzić na przykład chłodzenie przez odparowanie.”

Natomiast na stronie 117 autor pisze:

„... dla dostatecznie dużych indukowanych momentów dipolowych następuje stabilizacja układu, a zderzenia elastyczne przeważają nad reaktywnymi.”

Jeśli chodzi o sposób prezentacji wyników, to w większości jest on poprawny. Można jednak doszukać się zwrotów żargonowych lub niezbyt eleganckich. Razi mnie używanie słowa dystans (str. 37), oraz sformułowania takie jak „cząstki mają więcej czasu za barierą siły odśrodkowej na reakcję chemiczną” (str. 101), czy też „równanie wyznacza energie własne dla rozwiązań niezerowych w miejscu występowania potencjału delta” (str. 23).

Rezultaty przedstawione w rozprawie doktorskiej zostały opublikowane w artykułach naukowych w New Journal of Physics, Physical Review A i Physical Review Letters. Jak obiecuje autor, dwie kolejne prace z wynikami przedstawionymi w rozprawie doktorskiej są w przygotowaniu. Mgr M. Krych jest poza tym autorem dwóch innych publikacji. Jest to bardzo duży dorobek naukowy.

Publikacje naukowe, których wyniki zamieszczone są w rozprawie, są współautorskie i dlatego dobrze byłoby jasno powiedzieć, które wyniki są indywidualnym osiągnięciem doktoranta. Jak dowiedziałem się rozmawiając z autorem, prawie wszystkie wyniki przedstawione w rozprawie doktorskiej mgr Michała Krycha są jego indywidualnym osiągnięciem. Jednak dla pełnego opisu, autor w kilku miejscach posłużył się wynikami uzyskanymi przez współpracowników. Mgr M. Krych nie zaznaczył jasno, że wykresy 2.5, 2.6 i 2.10 dotyczące dynamiki jednocząstkowej gęstości gazu Tonksa-Girardeau zostały wykonane przez grupę prof. Buscha z Irlandii. Nie są to wykresy istotne dla rozważań przedstawionych w tym rozdziale. Uwagę o starannym wyodrębnieniu wkładu własnego czynię dlatego, że nowa ustawa o stopniach i tytule naukowym dopuszcza obecnie złożenie rozprawy doktorskiej w postaci cyklu publikacji

zbiorowych. Cieszę się, że mgr Michał Krych nie zdecydował się na tę nową formę przedstawiania rozpraw doktorskich, lecz pozostał przy staromodnej, solidnej rozprawie, w której zostały przedstawione oryginalne, własne rezultaty.

Podsumowując, bardzo wysoko oceniam rozprawę doktorską mgr. Michała Krycha. Wyniki przedstawione w rozprawie są oryginalne i blisko związane z aktualnymi badaniami doświadczalnymi. Oddziaływanie w zimnych układach atomowych i cząsteczkowych decydują o możliwości ich schłodzenia do ultra niskich temperatur oraz o właściwościach tych układów. Mgr M. Krych rozważał w swojej rozprawie, nowe często egzotyczne układy, o których niewiele wiadomo. Pokazanie, kiedy zderzenia elastyczne dominują w chłodzeniu molekuł, molekuł polarnych czy jonów są ważnymi przewidywaniami otwierającymi nowe perspektywy doświadczalne. Stworzenie prostego modelu zderzeń z uwzględnieniem procesów reaktywnych w ramach dwukanałowego opisu dostarcza prostego ale i skutecznego narzędzia do obliczania elastycznych i nieelastycznych szybkości zderzeń. Badania prowadzone przez mgr. Michała Krycha są na najwyższym światowym poziomie. Liczba oryginalnych wyników przedstawionych w rozprawie, jak również ich jakość naukowa daje mi podstawę do postawienia wniosku o wyróżnienie rozprawy.

Nie mam najmniejszych wątpliwości, że rozprawa doktorska spełnia z nadmiarem wszelkie ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane przed rozprawami doktorskimi i wnioskuję o dopuszczenie mgr. Michała Krycha do publicznej obrony.


Mariusz Gajda

Warszawa 11. 11. 2013 r.

Uzasadnienie wniosku o wyróżnienie rozprawy doktorskiej

mgr. Michała Krycha

Wyniki przedstawione w rozprawie są oryginalne i blisko związane z aktualnymi badaniami doświadczalnymi. Oddziaływania w zimnych układach atomowych i cząsteczkowych decydują o możliwości ich schłodzenia do ultra niskich temperatur oraz o właściwościach tych układów. Mgr M. Krych rozważał w swojej rozprawie, nowe często egzotyczne układy, o których niewiele wiadomo. Pokazanie, kiedy zderzenia elastyczne dominują w chłodzeniu molekuł, molekuł polarnych czy jonów są ważnymi przewidywaniami otwierającymi nowe perspektywy doświadczalne. Stworzenie prostego modelu zderzeń z uwzględnieniem procesów reaktywnych w ramach dwukanałowego opisu dostarcza prostego ale i skutecznego narzędzia do obliczania elastycznych i nieelastycznych szybkości zderzeń. Badania prowadzone przez mgr. Michała Krycha są na najwyższym światowym poziomie. Rozprawa doktorska mgr. Michała Krycha zawiera rozwiązanie pięciu oryginalnych zadań, a materiał przedstawiony w rozprawie mógłby stanowić podstawę do dwóch solidnych rozpraw doktorskich. Rezultaty badań mgr. M. Krycha zostały opublikowane w trzech artykułach naukowych w prestiżowych pismach: New Journal of Physics, Physical Review A i Physical Review Letters. Dwa inne artykuły są w przygotowaniu.

Liczba oryginalnych wyników przedstawionych w rozprawie, jak również ich jakość naukowa daje mi podstawę do postawienia wniosku o wyróżnienie rozprawy.

M. Gajda
Mariusz Gajda