

Warszawa, 15 listopad 2013.

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Michała Krycha zatytułowanej „Modelowanie dynamiki zderzeń atomów, jonów i cząsteczek w ultraniskich temperaturach”.

Przedmiotem rozprawy doktorskiej pana mgr Michała Krycha pod tytułem „Modelowanie dynamiki zderzeń atomów, jonów i cząsteczek w ultraniskich temperaturach” jest dynamika zderzeń atomów, jonów i cząsteczek w pobliżu temperatury krytycznej, gdzie pojawia się efekt kwantowej degeneracji. W szczególności praca obejmuje tematykę aktualnie badanych eksperymentalnie układów hybrydowych, łączących cząstki naładowane z cząstkami neutralnymi w jednym układzie doświadczalnym. Praca została napisana w języku polskim pod opieką dr hab. Zbigniewa Idziaszka w Instytucie Fizyki Teoretycznej na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego. Temat pracy jest bardzo aktualny, a praca zawiera nowe, oryginalne wyniki, które zostały już opublikowane, bądź są w trakcie publikacji w wiodących międzynarodowych czasopismach naukowych. Trzy prace, które stanowią treść poszczególnych rozdziałów dysertacji zostały opublikowane w Physical Review Letters, New Journal of Physics oraz Physical Review A. Materiał zgromadzony tutaj jest bardzo obszerny i przedstawia bardzo wysoki poziom naukowy.

Rozprawa doktorska pana Michała Krycha składa się z sześciu rozdziałów, w tym pięciu opisujących oryginalne wyniki badań naukowych oraz Posumowania. Poniżej przedstawiam krótkie omówienie zawartości poszczególnych rozdziałów dysertacji.

Rozdział pierwszy stanowi wprowadzenie do tematyki rozprawy doktorskiej. Pan mgr Krych nie zajmuje się w nim długimi opisami fizyki zimnych atomów – kondensatów Bosego Einsteina, jak większość prac z tej dziedziny które miałem przyjemność recenzować. Przechodzi do szczegółów oddziaływań atom – jon, jako że to właśnie jest przedmiotem jego zainteresowania. Podaje za to bardzo szczegółowy (jak na rozdział wstępny) opis tych zjawisk, i muszę przyznać, że przynajmniej dla mnie ten rozdział jest bardzo wartościowy i pedagogiczny. Autor omawia po kolei, oddziaływanie atom-jon wraz opisem eksperymentów, elastyczne zderzenia atomów i jonów, zderzenia nieelastyczne, a następnie reakcje chemiczne z udziałem zimnych atomów, w tym przekaz ładunku, reakcje wygaszające, formowanie się naładowanych cząsteczek i reakcje molekularne. W dalszej części rozdziału poznajemy także rezonanse Feshbacha w układzie atom-jon, polarony w reżimie silnego sprzężenia, mezoskopowe jony molekularne, sprzężenie fononów z gazem Fermiego oraz transport ładunku. Wymieniłem te zagadnienia, które częściowo są tytułami poszczególnych paragrafów tego rozdziału, aby oddać bogactwo i różnorodność tematów poruszanych w pracy, ale także, aby ukazać, że obejmują one bardzo zaawansowane zagadnienia wykraczające poza standardową tematykę zimnych atomów.

W rozdziale drugim znajdujemy omówienie wyników przedstawionych w artykule „An eccentrically perturbed Tonks–Girardeau gas” opublikowanym w New Journal of Physics i dotyczących dynamiki jednowymiarowego gazu Tonksa-Girardeau w pułapce harmoniczej w obecności niejednorodności reprezentowanej przez potencjał delta Diraca. Gaz Tonks-Girardeau jest odpowiednikiem klasycznego jednowymiarowego gazu twardych kul. W ciasnej pułapce liniowej, dzięki silnym oddziaływaniom odpychającym zaobserwować można intrygujące zachowanie bozonów, których funkcje falowe przestają się przekrywać, a

użytecznym w opisie układu staje się wyznacznik Slatera właściwy dla fermionów. Wyprowadzono analityczne funkcje jednocząstkowe dla atomu zderzającego się z niejednorodnością, a na podstawie nich skonstruowano opis układu wielociałowego. Znalaziono profil gęstości gazu oraz jednocząstkowa macierz gęstości. Zaprezentowano także wpływ niejednorodności na koherencję w układzie i zaproponowano eksperyment, który mógłby go zbadać.

W tym miejscu chciałbym podzielić się pewną uwagą krytyczną. Autor pracy, pewnie dlatego, że część tekstu tłumaczył z oryginalnych publikacji w języku angielskim, nie ustrzegł się stosowania wyrażen zargonowych. Pojawiają się one w całej pracy, ale czytając ten rozdział natknąłem się na ich dużą kumulację. Mamy na przykład: „problem może zostać rozwiązany przez zmapowanie na idealny gaz bezspinowych fermionów”, „potencjały są ciasne w kierunkach transwersalnych”, „w celu użycia przepisu na mapowanie bozonowo-fermionowe”, itd. Jest takich niefortunnych sformułowań dosyć dużo i uważałem za wskazane o nich wspomnieć, aby autor dysertacji zwrócił na to uwagę pisząc w przyszłości teksty naukowe po polsku.

Rozdział trzeci jest zatytułowany „Dwuciałowa dynamika jonu zanurzonego w zimnym gazie atomowym”. Stanowi on podsumowanie publikacji z *Physical Review A* i dotyczy chłodzenia jonu baru poprzez zderzenia z ultrazimnymi atomami rubidu. Pan Michał Krych rozwiązując ten problem miał okazję zmierzyć się z obliczeniami kwantowo-chemicznymi dotyczącymi konkretnych atomów, z obliczeniami typu *ab initio*. Zostały one wykonane we współpracy z grupą prof. Moszyńskiego z Wydziału Chemii UW i miały na celu wykazanie, że sympatyczne chłodzenie jonu Ba^+ poprzez zderzenia z atomami ultrazimnego Rb jest możliwe i że proces ten będzie bardzo efektywny z punktu widzenia dwuciałowych własności rubidu i baru.

W celu wyznaczenia krzywych energii potencjalnej jonu molekularnego $(BaRb)^+$ w przybliżeniu Borna-Oppenheimera zastosowano najbardziej aktualne metody *ab initio*. Energia potencjalna stanu podstawowego została wyznaczona na podstawie metody sprzężonych klasterów. Znalaziono relatywistyczne (uwzględniających sprzężenie spin-orbita) krzywe energii potencjalnej dla stanów 0^+ i 1 . Są one ważne z punktu widzenia konkretnych, wykonywanych ostatnio eksperymentów. Uzyskana struktura elektronowa została wykorzystana w obliczeniach jednokanałowych mających na celu wyznaczenie zderzeniowych przekrojów czynnych pomiędzy jonem Ba^+ a atomem Rb. Skorzystano zarówno z relatywistycznych, jak i nierelatywistycznych potencjałów. Z obliczeń wynika, że nieelastyczny proces przekazu ładunku z atomu Rb do jonu Ba^+ (niepożądany z punktu widzenia eksperymentalnego w kontekście chłodzenia sympatycznego) jest znacznie mniej prawdopodobny niż procesy elastyczne w dużym zakresie energii - aż do mikro kelwinów.

W podsumowaniu sędzę, że te obliczenia, inne w swoim charakterze niż te prezentowane w pozostałych rozdziałach dysertacji wykazały, że pan Michał Krych jest w stanie rozwiązywać bardzo różnorodne zadania, w tym te wymagające dużych symulacji numerycznych, rozumie i potrafi stosować „prawdziwą” fizykę atomową i chemię kwantową. Badania te mają silne implikacje doświadczalne i już zostały dostrzeżone przez grupy prowadzące tego typu eksperymenty.

Rozdział czwarty jest zatytułowany „Wielociałowa dynamika jonu zanurzonego w zimnym gazie atomowym”. Rozważono w nim zagadnienie ruchu pojedynczego jonu w pułapce o częstości radiowej znajdującego się w kontakcie z zimnym gazem neutralnych atomów (o spinie całkowitym). Jest to rodzaj chłodzenia sympatycznego. Rozważano dwa

przypadki, gdy gaz znajduje się w stanie termicznym i gdy jest on w stanie kondensatu Bosego Einsteina. Zastosowano równanie master opisujące chłodzenie sympatyczne oraz znaleziono prędkości chłodzenia i końcowe energie jonu. Pokazano, że zimny rezerwuar atomowy modyfikuje diagramy stabilności jonu w pułapce Paula i tworzy regiony, gdzie jon jest chłodzony lub ogrzewany poprzez wymianę kwantów energii z potencjałem zależnym od czasu. Wykazano także, że w trakcie chłodzenia pojawia się tzw. mikroruch i stanowi on ważne źródło grzania i ogranicza końcowe energie jonów do wartości większych niż około $100\mu\text{K}$ w przypadku parametrów właściwych dla obecnych eksperymentów. Badania tu zaprezentowane stanowią pierwszą próbę w pełni kwantowego podejścia do problemu sympatycznego chłodzenia jonu i mają dużą wartość poznawczą.

Materiał w tym rozdziale jest opisany dosyć skrótowo, ale moim zdaniem wyprowadzenie równania Master dla zagadnienia kwantowego jest sporym osiągnięciem oraz świadectwem dobrego opanowania technik rachunkowych. Jednocześnie obliczenia są wykonane dla konkretnych jonów i atomów i mogą być zweryfikowane w eksperymencie stanowiąc pewny punkt odniesienia. Konkretnie przewidywania np. fakt, że w niektórych przypadkach obniżanie temperatury gazu bozonowego nie poprawia sprawności chłodzenia, albo to, że niższe temperatury można osiągnąć poprzez zmniejszenie częstości radiowej pułapki jonowej lub poprzez redukcję wartości parametru q kontrolującego amplitudę mikroruchu, mogą stanowić wskazówki dla eksperymentów wykonywanych w grupach prof. Johannesesa Denschlaga czy prof. Michaela Kohla. Wyniki osiągnięte w tym rozdziale także oceniam bardzo wysoko.

Kolejny rozdział zatytułowany „Reaktywne zderzenia dla oddziaływań potęgowych w zakresie od ultraniskich do wysokich temperatur” opisuje wyniki badań zderzeń, złożonych układów molekularnych, dla których obliczenia ab initio stają się bardzo trudne, albo wręcz niemożliwe. Wtedy z pomocą przychodzi formalizm defektu kwantowego. Jest to przykład prostego modelu reaktywnych zderzeń, który oddaje najważniejsze cechy fizyczne zjawiska, bez wprowadzania wszystkich szczegółów dotyczących oddziaływania zderzających się cząstek. Okazuje się, że zderzenia można charakteryzować za pomocą funkcji defektu kwantowego, długości rozpraszania t i pojedynczego parametru, który opisuje reaktywność pary cząsteczek na małych odległościach.

W niniejszym rozdziale znajdujemy wprowadzenie do modelu defektu kwantowego, następnie przy jego użyciu przeanalizowano granicę szybkości zderzeń dla niskich oraz wysokich energii i stwierdzono, że prezentowane rozwiązania mają zarówno właściwe zachowanie progowe, jak i klasyczną granicę wysokoenergetyczną. Przedyskutowano rolę tunelowania i odbicia kwantowego od bariery siły odśrodkowej. Zaprezentowano kwantowe poprawki do wyników wyprowadzonych w ramach fizyki klasycznej. Potem skupiono się na potencjale van der Waalsa, gdzie zaprezentowano przewidywania dotyczące szybkości zderzeń i w końcu, rozważany model z sukcesem zastosowano do opisu eksperymentu, dotyczącego jonizacji Penninga argonu za pomocą metastabilnych atomów helu.

Ten rozdział zawiera bardzo wiele ciekawych wyników, materiał został opublikowany w *Physical Review Letteres*, we współpracy z jednym z największych na świecie specjalistów w tej dziedzinie, profesorem Paulem Jullienem. Jednak mnie osobiście sposób prezentacji metody defektu kwantowego w niniejszej dysertacji wydaje się niedostateczny z pedagogicznego punktu widzenia. Autor prezentuje odpowiednie wzory, ale w moim pojęciu w niedostateczny sposób odwołuje się do intuicji fizycznych.

Szósty rozdział dysertacji dotyczy reaktywnych zderzeń polarnych cząsteczek w układach o obniżonej wymiarowości. Zderzenia ultrazimnych polarnych cząsteczek mogą prowadzić do kondensacji spolaryzowanego przez zewnętrzne pole elektryczne gazu molekularnego. Badania prezentowane w tym rozdziale mają za zadanie dostarczyć danych niezbędnych do przeprowadzenia odnośnych prac doświadczalnych, czyli np. stosunku szybkości zderzeń elastycznych i nieelastycznych, aby unikać niepożądanych efektów krótkozasięgowych (reakcje chemiczne). Zastosowany model charakteryzowany jest przez dwa bezwymiarowe parametry defektu kwantowego. Pierwszy opisuje prawdopodobieństwo reakcji, drugi definiuje fazę funkcji falowej na małych odległościach. Dla dużych wartości momentów dipolowych zaobserwowano tłumienie reaktywnych zderzeń, prowadzące do stabilizacji gazu ultrazimnych polarnych molekuł. Obliczenia zostały wykonane za pomocą wielokanałowej propagacji funkcji falowej.

Praca została przedstawiona przejrzystie i spójnie, zawiera bogactwo bardzo ważnych i różnorodnych wyników badań. Autor przygotowując tę rozprawę wykazał się zrozumieniem opisywanych zjawisk, oraz sprawnością zarówno w obliczeniach numerycznych jak i rozważaniach teoretycznych. W dodatku brał udział zarówno w badaniach, których celem jest znalezienie uniwersalnych modeli do badania zjawisk, jak i w badaniach gdzie stosuje się bardzo konkretne i szczegółowe dane atomowe i nawet chemiczne do stworzenia modeli ab initio. Nie unikał też bardzo zaawansowanych obliczeń numerycznych. Pan Michał Krych jest współautorem co najmniej czterech prac w bardzo dobrych czasopismach naukowych o wysokim „Impact factor”, w tym jednej w Physical Review Letters i stał się specjalistą w dziedzinie chłodzenia jonów i zderzeń zimnych atomów. Moim zdaniem wykazał się też bardzo dobrą znajomością literatury. Lista cytowanych prac jest imponująca i bardzo wyczerpująca. Reasumując: przygotowanie pracy doktorskiej, w przypadku pana Michała Krycha skutkowało zdobyciem dużego doświadczenia w prowadzeniu badań naukowych, stworzeniem dobrego warsztatu naukowego, zarówno analitycznego jak i numerycznego, i mamy teraz do czynienia z młodym zdolnym i dobrze się zapowiadającym fizykiem, gotowym do sprostania nowym wyzwaniom naukowym.

Stwierdzam, że rozprawa Pana mgr Michała Krycha spełnia wszelkie wymagania stawiane pracom doktorskim z dziedziny fizyki. Jednocześnie wnoszę o jej wyróżnienie. Uzasadnienie przedstawiam w odrębnym dokumencie.

Wnoszę o dopuszczenie kandydata do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Prof. Marek Trippenbach

