



**Center for Theoretical Physics
Polish Academy of Sciences**

Aleja Lotników 32/46, 02-668 Warsaw

Tel. (+48 22) 847 09 20, Fax/Tel: (+48 22) 843 13 69

E-mail: cft@cft.edu.pl, NIP: 525-000-92-81, REGON: 000844815

Warszawa, 2 lutego 2023 r.

dr hab. Krzysztof Pałowski, prof. CFT PAN
pawlowski@cft.edu.pl
Al. Lotników 32/46
02-668 Warszawa

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Dariusza Wiater zatytułowanej
„Quantum effects in ultracold collisions of atoms, ions, and molecules”**

Napisana po angielsku rozprawa doktorska „Quantum effects in ultracold collisions of atoms, ions, and molecules” przedstawia wyniki obliczeń numerycznych i analitycznych, z których część była wykorzystana w dwóch publikacjach naukowych, w *Nature* i *Nature Physics*, będących podstawą rozprawy. Oba artykuły są efektem współpracy grupy promotora rozprawy dr. hab. Michała Tomzy z grupami doświadczalnymi z Amsterdamu oraz Fryburgu.

Rozprawa dotyczy teoretycznego opisu zderzeń między ultrazimnymi atomami oraz jonem. Autor wykonał szereg obliczeń, w przeważającej części numerycznych, aby znaleźć parametry charakteryzujące zderzenia jonu iterbu z atomami litu oraz jonu baru z atomami litu. Osiągane wyniki pozwalały na owocną współpracę z grupami doświadczalnymi. Najważniejszym efektem współpracy z grupą doświadczalną R. Gerritsy było pokazanie kwantowych efektów w zderzeniach atom-jon (publikacja *Nature Physics* 16, 413–416 (2020)). Była to pierwsza demonstracja efektów kwantowych w układzie atom-jon. Z kolei badania nad zderzeniami baru i litu były podstawą współpracy i wspólnej publikacji z grupą Tobiasa Schaezta, w której zmierzono i częściowo scharakteryzowano tzw. rezonanse Feshbacha w zderzeniach atom-jon (publikacja w *Nature*, 600, 429–433 (2021)). Była to pierwsza demonstracja rezonansów Feshbacha dotyczących zderzeń atomów z jonem.

Opis zawartości pracy

Rozprawa składa się z dziewięciu rozdziałów zebranych w cztery części oraz dodatki. Autor zaczyna pierwszy rozdział od wyłożenia podstaw teorii rozpraszania, po czym opisuje różne zagadnienia dotyczące ultrazimnych cząstek. Następuje „przeskok” do modelu bozonów i fermionów w sieciach optycznych, następnie do jednowymiarowego modelu fermionów, po których opisywane są polarony i jony. Wstęp pokazuje zainteresowania autora wykraczające poza tematykę rozprawy, ale dobór zagadnień i równań wydaje się momentami losowy.

Z pewnością ważniejszym rozdziałem jest rozdział drugi wprowadzający czytelnika w teorię rozpraszania, zastosowaną do opisu zderzeń między jonem i atomem. W tym rozdziale Autor definiuje wielkości charakteryzujące zderzenia (długości rozpraszania i przekroje czynne) oraz tłumaczy czym są rezonanse Feshbacha. Autor prezentuje szeroką wiedzę w tematyce rozprawy, chociaż niektóre fragmenty mogły być napisane jaśniej. Zbadanie rozpraszania wymaga znajomości potencjału oddziaływania między cząstkami. Potencjał oddziaływania dla dużych odległości jest powszechnie znany (w przypadku oddziaływań atomów z jonem



**Center for Theoretical Physics
Polish Academy of Sciences**

Aleja Lotników 32/46, 02-668 Warsaw

Tel. (+48 22) 847 09 20, Fax/Tel: (+48 22) 843 13 69

E-mail: cft@cft.edu.pl, NIP: 525-000-92-81, REGON: 000844815

dominującym członem jest $1/R^4$, gdzie R to odległość między cząstkami), ale jego dokładne obliczenie metodami ab initio dla dowolnych odległości między cząstkami jest niezwykle trudne. Zadanie to, jak podkreśla w rozprawie jej Autor, zostało jednak wykonane wcześniej przez dra hab. Michała Tomzę, dając podstawę do badania zderzeń.

Kolejne dwa rozdziały przedstawiają układy i techniki doświadczalne. W szczególności Autor dokładnie dyskutuje techniki schładzania i pułapkowania atomów i jonów. To ładne podsumowanie tej tematyki, chociaż do kompletu Autor mógł opisać w bardziej bezpośredni sposób chłodzenie jednych cząstek poprzez zderzenia z innymi („sympathetic cooling”).

Kluczowe rozdziały są zawarte w czwartej części rozprawy. Najpierw Autor w szczegółach opisuje swoje badania nad zderzeniem jonu iterbu z litem w kontekście eksperymentów przeprowadzanych w Amsterdamie. Autor omawia potrzebę skalowania potencjału oddziaływania, dokonuje analizy zderzeń prowadzących do zmiany stanu wewnętrznego jonu i uzyskuje na podstawie tej analizy i porównania z doświadczeniem długości rozpraszania. Zgodność teorii z doświadczeniem (rysunek 40) jest jednym z najważniejszych wyników, pokazujących po raz pierwszy osiągnięcie tzw. reżimu kwantowego w układzie jon-atomy. Dowodem na to jest nietrywialna zależność prawdopodobieństwa zmiany stanu wewnętrznego jonu od energii zderzenia. Rozdział 7 jest poświęcony badaniu zderzenia jonu baru z litem. Autor opisuje swoje próby obliczenia rezonansów Feshbacha zmierzonych w Fryburgu. Autor atakował problem z różnych stron. Analiza różnych modeli doprowadziła go do wniosku, że kluczowe do opisu jest uwzględnienie sprzężenia spin-orbita oraz wyższych fali parcjalnych. Obliczenia uwzględniające wszystkie te elementy są jednak niezwykle trudne. Autor uzyskał częściowe wyniki – poprawnie (zgodnie z doświadczeniem) wskazując położenie pięciu rezonansów Feshbacha.

Rozdział ósmy odbiega od głównego nurtu rozprawy. Przedstawia szereg wyników analitycznych dla uproszczonego modelu zderzenia atomu z molekułą. To krótki rozdział, który zdaje się niedokończony. Rozprawa kończy się bardzo skrótowym podsumowaniem.

Kwestie redakcyjne

Z obowiązku muszę wypisać zastrzeżenia do pracy. Według mnie jedną z wad jest prezentowanie bardzo wielu rysunków bez ich dyskusji. Dla przykładu seria rysunków od 27 do 37, zawiera oryginalne wyniki obliczeń, ale zupełnie nie jest jasne jakie informacje są tutaj istotne. Rozprawa zawiera aż 84 ilustracje, ale czasami brakuje syntezy tych rysunków. Mam też uwagi do strony redakcyjnej. Niektóre istotne informacje są rozrzucone po całej rozprawie utrudniając zrozumienie treści. Dla przykładu potencjały oddziaływania wprowadzone na stronie 23 i dane wzorami (44) i (45) są dokładniej wyjaśnione dopiero na stronie 87. Praca ma dość dużo literówek, niektóre są kilkakrotnie powtarzane (jak „scattering lenght”). Zdarzają się „zdania” bez czasownika, błędy stylistyczne, czy zdania zaczynające się równaniem – na przykład po równaniu (53). Autor popełnił też literówki w równaniach oraz stosuje notacje, w której nie odróżnia wektorów od skalarów. To wszystko utrudnia podążanie za obliczeniami.



Center for Theoretical Physics Polish Academy of Sciences

Aleja Lotników 32/46, 02-668 Warsaw

Tel. (+48 22) 847 09 20, Fax/Tel: (+48 22) 843 13 69

E-mail: cft@cft.edu.pl, NIP: 525-000-92-81, REGON: 000844815

Pytania do Autora

Autor wielokrotnie używa pojęcia reżim kwantowy. Często nie jest jasne co stoi za tym pojęciem. Czytelnik mógł oczekiwać jakościowej dyskusji zderzeń, wskazania kiedy efekty kwantowe zaczynają odgrywać rolę i jakich kwantowych zjawisk można się spodziewać.

W rozdziale przedstawiającym długość rozpraszania momentami tok rozumowania nie jest jasny. Dla przykładu Autor przedstawiając wyprowadzenie rozwiązania równania Schroedingera nakłada warunek brzegowy w granicy nieskończonej odległości między cząstkami, równanie (37). Natomiast te warunki brzegowe wpływają na wartość długości rozpraszania, która była celem obliczeń (równanie (39)). Rozdział ten bez podania większej liczby szczegółów (np. postaci macierzy J , N i K , wskazania co jest dane na wstępie, a jakie wielkości należy obliczyć) jest niejasny.

Rozprawa jest zapewne dobrym punktem wyjścia do kolejnych, ciekawych badań. Dla przykładu, Autor pokazuje ilustracje poziomów energetycznych dla różnych izotopów. Część jest fermionami, część bozonami. Ciekawi mnie, jaki byłby efekt kwantowej statystyki na zderzenia. W tym kontekście interesującym zagadnieniem jest rozszerzenie badań na problem zderzenia trzech ciał – jonu i dwóch atomów. Jakie są największe trudności przy takich obliczeniach?

Spełnienie ustawowych wymogów

Podsumowując, Autor wykazał się ogólną wiedzą teoretyczną w dyscyplinie. Rozumowania przedstawione w pracy wskazują, że Autor rozprawy potrafi samodzielnie prowadzić pracę naukową. Przedmiotem rozprawy jest obliczenie parametrów charakteryzujących zderzenia jonu i atomu w wybranych układach. Obliczenie tych parametrów oraz rezonansów Feshbacha w układzie bar-lit jest oryginalnym rozwiązaniem problemu naukowego.

Uzasadnienie wyróżnienia

Rozprawa zawiera zarówno obliczenia analityczne oraz pełen wachlarz metod numerycznych. Autor uzyskał wspaniałe wyniki – zgodność teorii z doświadczeniem jest kwintesencją pracy fizyka-teoretyka. Wyniki obliczeń stały się częścią ważnych osiągnięć – pionierskich eksperymentów i zrozumienia zderzeń w układach jon-atomy. Autor umiejętnie połączył pracę teoretyka ze współpracą z grupami doświadczalnymi. O randze wspólnych osiągnięć świadczy pośrednio prestiż czasopism, w których opublikowano wyniki (Nature i Nature Physics).

Konkluzja

W związku z powyższym uważam, że rozprawa spełnia wymagania ustawowe oraz warunki wskazane przez Senat Uniwersytetu Warszawskiego. **Rozprawę oceniam pozytywnie i wnioskuję o dopuszczenie mgr. Dariusza Wiatra do dalszych etapów postępowania doktorskiego.** Ze względu na wysoką rangę przedstawionych w pracy osiągnięć, opisanych powyżej, **wnioskuję o wyróżnienie rozprawy doktorskiej.**