



Piotr Żuchowski, Prof. UMK
(pzuch@fizyka.umk.pl)
(piotr.zuchowski@gmail.com)
tel +48 784647638
room number 470)

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Dariusza Wiatera "Quantum effects in ultracold collisions of atoms, ions, and molecules"

Ultrazimne jony w układach hybrydowych stanowią obecnie jeden z najbardziej badanych obszarów fizyki atomowej i molekularnej. Ultrazimna materia z samymi jonami wykorzystywana jest już jako podstawa budowy komputerów kwantowych, zegarów atomowych czy też do badania "nowej fizyki" w ultraprecyzyjnych pomiarach. Magister Dariusz Wiater podjął się nietatwego wyzwania zbadania efektów zderzeniowych u układach jon-atom neutralny. Główną osią rozprawy są doświadczenia przeprowadzane w dwóch grupach eksperymentalnych. I tak, układ zawierający ultrazimny jon Yb^+ pułapkowany z atomami Li zbudowany został przez grupę Rene Gerritsmy na Uniwersytecie w Amsterdamie, natomiast grupa Tobiasa Schaetza zbudowała analogiczny eksperyment dla układu Li - Ba^+ . Współpraca grupy Prof. Tomzy z wyżej wymienionymi grupami eksperymentalnymi przyniosła szereg przełomowych prac w których: i) osiągnięto reżym kwantowy w zderzeniach YbLi^+ (pojedyncze fale parcjalne) ii) znaleziono magnetycznie kontrolowane rezonanse Feshbacha w układzie BaLi^+ .

Rozprawa jest napisana w języku angielskim i liczy ok 120 stron. Najpierw omówię kompozycję pracy. Jest to dość eklektyczna struktura, której mamy krótki wstęp, który dotyczy fizyki kilku-ciałowej, efektów "impurity" (domieszek - to może dobre polskie określenie tego słowa) i ultrazimnych zderzeń. We wstępie pobieżnie omówione są ultrazimne zderzenia, bardzo pobieżnie - to jest dosłownie 8 równań. Wprowadzona zostaje długość rozpraszania i nieco doraźnie Hamiltonian Grossa-Pitajewskiego. Oczywiście jest to jeden z przykładów dot. pojawienia się długości rozpraszania w opisie układów wielu ciał, ale z pewnością nie jedyny. Rozprawa nie dotyczy w badania kondensatu Bosego-Einsteina, a żaden aspekt zderzeniowy poruszany w pracy nie prowadzi do tego zjawiska. Pod równaniem 8 znajduje się stwierdzenie:

"The standard Hamiltonian describing the contact interaction of N particles (which is a good approximation at low temperature) in the external potential takes the form[6]: "

które w moim odczuciu nie pasuje do kontekstu w rozdziale 1.2. Kolejne podrozdziały wstępu omawiają: atomy w sieci optycznej (co przyznam też nie ma związku z treścią rozprawy), jony w pułapce (rozdział 1.5) - jak najbardziej na miejscu aczkolwiek jest tego niewiele.

Rozdział 2 stanowi tak naprawdę kontynuację wstępu, i można go było umieścić niemal w całości obok rozdziału 1.2. W nim znajduje się: omówienie krzywych energii potencjalnej, zachowanie asymptotyczne energii potencjalnej, opis metody coupled clusters (rozdział 2.2.2). W tym ostatnim przypadku opis metody jest rwany i chaotyczny. Wprowadza się na przykład dwa rodzaje oznaczeń na operatory wzbudzeń: τ oraz w postaci ciągów operatorów kreacji i anihilacji z etykietami ABIJ (które nie są nota bene zdefiniowane). Do celów prezentacji wystarczyło 3 zdaniem opisać operatory τ i opis wyglądałby dobrze. Rozumiem, że praca nie dotyczyła obliczeń teorii struktury elektronowej, ale w takim kształcie opis wygląda na niestaranny. Następnie doktorant omawia podstawy teorii rozpraszania kwantowego (znów niejako w oderwaniu od rozdziału 1 - następuje dalszy ciąg historii), zjawiska rezonansu Feshbacha, omówienie stosowanych w pracy metod (metoda Numerowa, ABM), to wszystko jest jednak dość szczegółowe, pobieżne i chaotyczne. Mamy omówienie metody Numerowa ale nie mamy log-derivative, które jest wykorzystane w Molscat. Rozprawa dotyczy rozpraszania kwantowego lecz brakuje tu szczegółu: zderzenia w polu magnetycznym są zagadnieniem nowym i nietrywialnym i należałoby opisać dokładnie warsztat badawczy. Brakuje między innymi:

- omówienia bazy w jakiej wykonywane są obliczenia rozproszeniowe: mamy jedynie podane równanie 56, ale nie ma omówienia co to takiego, dlaczego baza jest rozprężona, dlaczego używamy rzutów a nie całego momentu pędu, jak wyglądają operatory w tej bazie, czym się odróżnia taka baza od standardowych, rotacyjnych, itp.
- dokładniejszego omówienia asymptotycznych warunków brzegowych (jakie wymiary mają macierze J i N ?)
- szczegółów jak przebiega propagacja, jaki jest jej krok, punkt startowy i końcowy, jak bardzo różnią się te parametry pomiędzy układami zawierające jony i układy neutralne (co jest szczególnie ważne biorąc pod uwagę szybsze znikanie potencjału w układzie jon-neutralny,

W związku z tymi brakami **proszę u przedstawić tych wszystkich szczegółów na obronie publicznej (dla obydwu układów)**. Powyższe kwestie są tym bardziej konieczne do podniesienia, ponieważ dwie prace podane jako główne osiągnięcie pracy nie zawierają zbyt wielu szczegółów obliczeń (z uwagi na to że formuła czasopism Nature i Nature Physics nie pozwala na to).

Rozdziały 3 i 4 ponownie można odczytać jako kontynuację wstępu, przedstawiono w nich bardzo istotne eksperymentalne informacje dotyczące eksperymentów będących głównym obiektem badań. Te części napisane zostały w dobry sposób: czuć dążą naukową wagę rozwiązywanego problemu i istotny kontekst obliczeń zderzeniowych w przedstawionej rozprawie. Z lektury tekstu tych rozdziałów wynika że autor posiada szeroką wiedzę ogólną z fizyki, potrafi jako teoretyk odnaleźć się w szczegółach złożonych eksperymentów fizycznych i przełożyć je dla czytającego rozprawę.

Podsumowując wstępne rozdziały rozprawy: gdyby materiał w częściach 1-4 został inaczej zorganizowany i podzielony została praca zyskałaby w mojej ocenie. W obecnym kształcie brakuje spójności i istnieje wrażenie że doktorant nie potrafi w syntetyczny sposób i dokonać przeglądu literatury i przedstawić kontekstu czytającemu. Do tego dochodzą

istotne braki dotyczące opisu metodologii w zakresie rozpraszania kwantowego w przypadku wielokanałowym. Rzeczy istotne są omówione pobieżnie, natomiast pojawiają się rzeczy mało istotne z punktu widzenia zderzeń jonów (na przykład rozdział 1.3, 1.4 i 1.6).

Część IV pracy zawiera już właściwe wyniki i przejdę do ich omówienia.

Rozdział 6 skupia się na układzie $\text{Li} - \text{Yb}^+$. Omówiona została metodologia i szczegóły specyficzne dla tego układu, tj. struktura nadsubtelna oraz poziomy Zeemana. Ciekawy jestem następującej rzeczy: z wykresu 38 wynika że długość rozpraszania jest mniej wrażliwa na skalowanie potencjału singletowego niż trypletowego. Biegunki wypadają tu na skalowaniu i 0.97 i 1.025. Naiwnie zapytam czy zdaniem doktoranta można byłoby współczesnymi metodami chemii kwantowej systematycznie poprawić jakość tego potencjału by móc mieć jedną zmienną mniej do wyznaczenia? dokładność $\pm 2.5\%$ wygląda na możliwą do zrealizowania dokładność. Głównym zadaniem doktoranta było wyznaczenie parametrów a_T , a_S , n_L . W tym celu modelować należało parametr S opisujący prawdopodobieństwo zmiany spinu, uwzględnić należało (poprzez splot) funkcję aparaturową (P_{eMM} w równaniu 68, niestety nieopisana) w modelu efektywnego prawdopodobieństwa “reakcji” między jonami. Udało się to bardzo dobrze, możliwe było wyznaczenie zakresu długości rozpraszania singletu i trypletu pasujących do zderzeń w bardzo szerokim zakresie energii kinetycznych. W rozdziale występują braki: omówienia czym jest K w równaniu 68, oraz nie ma dyskusji czym jest parametr n_L . Bez czytania oryginalnej publikacji w Nature Physics jest trudno zrozumieć co to takiego. **Poproszę o komentarz czy gdybyśmy mieli nieskończenie dokładny potencjał to czy parametr n_L możliwy byłby do wyznaczenia z pierwszych zasad.** Ponadto ubolewam nieco brak dyskusji pierwszego znalezienia rezonansu kształtu w zderzeniach niskoenergetycznych jonów w pułapce. Jak rozumiem w obliczeniach uwzględniono wiele fal parcjalnych. **W ilu z nich znaleziono rezonanse i czy one po prostu “rozmyły się” w strukturze? Przypuszczam więcej niż jednej?** Sprawę rozwiązałby wykres przekroju czynnego rozłożonego na fale parcjalne (przynajmniej kilku najniższych).

Rozdział 7 to z kolei wyznaczenie pozycji i charakteryzacja rezonansów Feshbacha zderzenia jonu z ultrazimnym atomem neutralnym. To była również pierwsza obserwacja tego typu rezonansów w jonach. Praca ta to też wielka nadzieja na przyszłość jeśli chodzi o kontrolowanie oddziaływaniami w układach hybrydowych. Ten rozdział jest staranny jeśli chodzi o opis efektów w oddziaływaniach, napisany wyczerpująco. Jest najlepszą częścią rozprawy. Zdziwiło mnie jednak nieco napisanie o metodzie RKHS jako “unstable” - RKHS działa niemal jak interpolacja więc w czym problem by ją używać? Z drugiej strony potencjał MLR (le Roy) jest też niezbyt stabilny dla bardzo dużych R gdzie może się zdarzyć przykra niespodzianka przy obliczaniu wykładników funkcji $\exp(-\phi(R)y_p(R))$ które muszą się skasować z członem $-D_e$ (numerycznie) by potencjał dążył do 0 (równanie 78) dla dużego R . Doświadczyłem tego kiedyś dla układu typu neutralny-neutralny i problem pojawiał się dla ok $400 a_0$. Stąd prosba o komentarz: do jakich odległości wykorzystano propagator w układzie BaLi^+ - tego szczegółu nie znalazłem?

Rozdział 8 to dla mnie spora zagadka. Jest to temat zupełnie inny niż reszta pracy, ale wstęp jest na tyle krótki, że początkowo nie rozumiałem do jakiego aspektu zderzeń on się odnosi. Potem dopiero pojawiła się wzmianka że chodzi o potencjał kontaktowy i cała praca to wyprowadzenie wzorów na atom + molekuła z modelowym anizotropowym potencjałem kontaktowym. W rozdziale pojawiają się wzory na potencjał efektywny, dla $J=0..2$ niestety rozdział nie zawiera żadnej ilustracji numerycznej równań ani przykładowego zastosowania teorii. Nie mamy też żadnego podsumowania tego rozdziału, wygląda on wręcz na urwany. Po lekturze tej części pracy pozostaje bardzo duży niedosyt i niezaspokojona ciekawość. **Może podczas obrony doktorant przedstawi przynajmniej przykładowe zastosowanie wprowadzonej teorii?**

Podsumowując: rozprawa dotyczy bardzo istotnych badań z zakresu fizyki teoretycznej (na pograniczu fizyki AMO, chemii kwantowej i fizyki chemicznej) i autor wyказаł się umiejętnością rozwiązywania oryginalnego problemu naukowego: obliczenia pozycji rezonansów Feshbacha pozwoliły doświadczalnikom odnaleźć je, modelowanie strat “spin-exchange” w funkcji długości rozpraszania wysokiego i niskiego spinu pozwoliło na znalezienie potencjału oddziaływania dimeru YbLi^+ i zrozumienie niskoenergetycznego rozpraszania dla tego układu. W związku z tym praca przesunęła znacząco granicę frontu badań w dziedzinie ultrazimnych zderzeń, czy układów hybrydowych. Nauka to jednak “stawanie na ramionach gigantów”, i gdyby odseparować dokonania gigantów (świetne grupy eksperymentalne, znakomity i niezwykle kreatywny promotor) do tego co od siebie do pracy włożył doktorant to pozostaje poczucie niedosytu. Jestem pewien że mgr Wiater wykonał kawał bardzo dobrej pracy analizując dane, fitując parametry a_S, a_T, n_L i znacząco przyczynił się do badania rezonansów w BaLi^+ . Praca teoretyczna mogła być pociągnięta jednak nieco dalej, lub chociaż lepiej opisana w rozprawie, w końcu jest to doktorat z fizyki teoretycznej. Z każdej z tych prac mogła powstać oddzielna dodatkowa publikacja teoretyczna jako follow-up. Szczegóły efektu spin-exchange dla $\text{Yb}^+ - \text{Li}$ zasługują na dalsze bardziej dokładne badania, na przykład efektów związanych z rezonansami w takich zderzeniach, badania dla $\text{Ba}^+ - \text{Li}$ są przedstawione w pracy znacznie dokładniej, ale również i tu follow-up paper przydałby się (tu dostrzegłem rysunki z pracy jeszcze nie opublikowanej, więc jest na to nadzieja). To samo dotyczy rozdziału 8. **Konkludując, stwierdzam jednak że braki w samej rozprawie są skompensowane przez bardzo wysoki wpływ na dyscyplinę opublikowanych prac które stanowią trzon rozprawy i pracę oceniam pozytywnie. Autor rozprawy potrafił rozwiązać nowy, nierozwiązany problem naukowy (przy pomocy znanych narzędzi), posiada wiedzę ogólną z fizyki - w szczególności dobrze rozumie kontekst swoich badań i eksperymentów które wyjaśniał - oraz potrafi pracować samodzielnie jako naukowiec (mimo braków w sposobie pisanie). Wnioskuje więc o dopuszczenie mgr. Dariusza Wiatera do dalszych etapów procedury doktorskiej.**

dr hab. Piotr Żuchowski prof. UMK

