

Mgr Wojciech Skomorowski  
Pracownia Chemii Kwantowej  
Wydział Chemii  
Uniwersytet Warszawski

Warszawa, 4. kwietnia 2013

Autoreferat rozprawy doktorskiej pt.:

**Teoretyczne badania tworzenia zimnych molekuł  
z wykorzystaniem spektroskopii fotoasocjacji i techniki  
współchłodzenia**

(Production of ultracold molecules by photoassociation  
spectroscopy and sympathetic cooling: a theoretical study)

Promotor: prof. dr hab. Robert Moszyński

W pracy przedstawiono wyniki badań teoretycznych dotyczących otrzymywania i własności ultrazimnych molekuł, tj. molekuł o temperaturze bliskiej zera bezwzględnego (0 w skali Kelvina).

Molekuły schłodzone do ultraniskich temperatur stanowią obecnie przedmiot intensywnie rozwijanych, interdyscyplinarnych prac naukowych na pograniczu fizyki i chemii. Prace te są motywowane przede wszystkim możliwościami zastosowania zimnych cząsteczek m.in w pomiarach spektroskopowych o niespotykanej dotąd precyzji, testowaniu fundamentalnych praw fizyki, czy też kontroli reakcji chemicznych na poziomie stanów kwantowych reagentów. Zimne cząsteczki mogą także być wykorzystane jako elementy architektury komputerów kwantowych oraz symulatorów kwantowych, służących na przykład do modelowania przejść fazowych.

Kamieniem milowym w rozwoju badań nad ultrazimną materią było otrzymanie pierwszego kondensatu Bosego-Einsteina w gazie atomów rubidu w 1995 roku. Obserwacja przejścia fazowego i powstanie kondensatu wymagało schłodzenia atomów rubidu do temperatury poniżej 1 mikrokelwina ( $< 10^{-6}$  K). Rozwój technik doświadczalnych opartych na chłodzeniu laserowym i efekcie Dopplera, zapoczątkowany w latach 80. XX wieku, pozwala obecnie na stosunkowo rutynowe chłodzenie niektórych atomów (przede wszystkim metali alkalicznych) do ultraniskich temperatur. Ze względu na skomplikowaną strukturę stanów wewnętrznych, otrzymywanie zimnych molekuł jest nieporównywalnie trudniejsze aniżeli atomów. Rozwinięcie efektywnych metod chłodzenia molekuł do temperatur znacznie poniżej 1 milikelwina ( $< 10^{-3}$  K) stanowi obecnie jeden z kluczowych celów badań nad zimną materią prowadzonych przez wiele grup badawczych, zarówno teoretycznych jak i doświadczalnych. Osiągnięcie tego celu pozwoli na obserwację

nowych zjawisk o czysto kwantowym charakterze, a także realizację w praktyce wspomnianego wyżej szerokiego spektrum zastosowań ultrazimnych cząsteczek.

Głównym celem badań teoretycznych przedstawionych w niniejszej pracy była analiza możliwości chłodzenia wybranych molekuł oraz jonów do ultraniskich temperatur na drodze fotoasocjacji oraz poprzez współchłodzenie (ang. *sympathetic cooling*) w gazie ultrazimnych atomów. Wybór układów molekularnych, dla których wykonano zasadnicze obliczenia dotyczące oddziaływania i dynamiki zderzeń w ultraniskich temperaturach, był ściśle związany z prowadzonymi pracami eksperymentalnymi.

Metoda współchłodzenia przez termalizację w gazie ultrazimnych atomów jest bardzo prosta koncepcyjnie. Została już pomyślnie wykorzystana do chłodzenia prostych jonów oraz niektórych atomów, jednakże nie udało się jeszcze zastosować tego podejścia do chłodzenia molekuł. W pracy przedstawiono wyniki obliczeń kwantowo-dynamicznych dla trzech układów:  $\text{LiH} + \text{Li}$ ,  $\text{OH} + \text{N}$  oraz  $\text{Ba}^+ + \text{Rb}$  w kontekście zastosowania tej techniki do otrzymywania ultrazimnych molekuł i jonów. Proces chłodzenia wodoru litu w zderzeniach z ultrazimnymi atomami litu był badany we współpracy z grupą doświadczalną dr. Michaela Tarbutta (Imperial College of London). W pierwszym etapie projektu wykonano bardzo dokładne obliczenia potencjału oddziaływania oraz przekrojów czynnych na zderzenia pomiędzy Li i LiH. Obliczone przekroje czynne posłużyły w drugiej części projektu do przeprowadzenia symulacji procesu współchłodzenia molekuł LiH przez zderzenia z atomami Li, wykorzystując różne sposoby pułapkowania molekuł. Pokazano, że najbardziej korzystnym dla procesu chłodzenia jest zastosowanie pułapki w postaci wnęki rezonansowej działającej przy częstościach mikrofalowych. Wyniki symulacji pokazały ponadto, że dla układów o dużej anizotropii potencjału oddziaływania, pułapki molekularne oparte tylko o stałe lub przemienne pole elektryczne nie gwarantują pożądanej termalizacji próbki, gdyż procesowi obniżania średniej temperatury molekuł towarzyszy jednocześnie bardzo szybki spadek ilości cząsteczek pozostających we wnętrzu pułapki.

W ramach drugiego projektu, dotyczącego badania dynamiki zderzeń pomiędzy molekułami i atomami otwartopowłokowymi w zewnętrznym polu magnetycznym, wykonano kwantowo-dynamiczne obliczenia przekrojów czynnych na zderzenia pomiędzy rodnikiem OH i atomem N. Rezultaty obliczeń pokazały, że współchłodzenie rodnika OH poprzez zderzenia z atomami azotu może być skuteczne jedynie w stosunkowo niewielkim zakresie energii zderzeń i natężenia pola magnetycznego, co wynika z istnienia silnych mechnizmów prowadzących do zderzeń nieelastycznych w tego typu układach. Analiza wyników pokazała ponadto, że zastosowanie lżejszych atomów jako czynników chłodzących takich jak Li lub H powinno być korzystniejsze dla efektywnego chłodzenia molekuły OH.

Trzeci projekt związany z potencjalnym zastosowaniem techniki współchłodzenia, dotyczył zbadania możliwości chłodzenia jonów  $Ba^+$  poprzez zderzenia z ultrazimnymi atomami Rb. Wyniki wstępnych obliczeń kwantowo-dynamicznych pokazały, że taki proces chłodzenia powinien być wysoce skuteczny a możliwe zderzenia nieelastyczne wynikające z przeniesienia ładunku pomiędzy  $Ba^+$  i Rb nie stanowią istotnej przeszkody dla pożądanej termalizacji.

Przykładem tzw. pośredniej metody otrzymywania ultrazimnych molekuł jest fotoasocjacja. Idea fotoasocjacji polega na utworzeniu wiązania pomiędzy dwoma zderzającymi się ultrazimnymi atomami w wyniku absorpcji fotonu o odpowiedniej energii. W pracy przedstawiono możliwy schemat otrzymywania ultrazimnych molekuł  $Sr_2$  w mocno związanych stanach rowibracyjnych, wykorzystując do tego metodę fotoasocjacji. Efektywność zaproponowanej ścieżki opiera się na wykorzystaniu sprzężenia spin-orbita pomiędzy silnie oddziałującymi stanami elektronowymi dimeru strontu. To oddziaływanie pomiędzy stanami elektronowymi umożliwia zarówno wydajną fotoasocjację atomów w pierwszym etapie procesu, jak i skuteczną drogę stabilizacji i tworzenia mocno związanych molekuł  $Sr_2$  w drugim etapie. Proponowany schemat tworzenia molekuł  $Sr_2$  mógł powstać dzięki wysoce dokładnym obliczeniom *ab initio* krzywych energii oddziaływania dla tej molekuły, których wyniki istotnie różniły się od uprzednio opublikowanych obliczeń, a jednocześnie były zgodne z najnowszymi danymi eksperymentalnymi.

Istotnym problemem poruszonym w rozprawie jest analiza asymptotyki oddziaływania dalekozasięgowego pomiędzy liniowymi molekułami otwartopowłokowymi a atomami w stanie podstawowym o symetrii S. Waga tego zagadnienia wynika z faktu, iż tego typu układy są szeroko rozważane w kontekście zastosowania metody współchłodzenia, a jednocześnie prawidłowy opis oddziaływania dalekozasięgowego jest kluczowy w badaniach dynamiki kwantowej w ultraniskich temperaturach. W pracy wyprowadzono ogólne wyrażenia na współczynniki van der Waalsa dla oddziaływania atomów w stanie S z molekułą liniową w dowolnym zdegenerowanym stanie elektronowym. Współczynniki te zostały wyrażone w pełni poprzez własności oddziałujących układów (momenty multipolowe, polaryzowalności, itd.), co nadaje im jasną interpretację fizyczną. Jednym z zastosowań tej teorii był wspomniany układ  $OH + N$ .

Rozprawa napisana jest w języku angielskim. Składa się z dwóch głównych części. Pierwsza część zawiera wprowadzenie do poruszanej tematyki, nakreślenie celów i motywacji podjętych badań, oraz zwięzłe omówienie stosowanych metod i otrzymanych wyników. Drugą część stanowią kopie siedmiu oryginalnych artykułów naukowych, opublikowanych w czasopismach o międzynarodowym zasięgu, zawierających szczegółowy opis uzyskanych wyników.