

mgr Iwona Majewska
Pracownia Chemii Kwantowej
Wydział Chemii
Uniwersytet Warszawski

AUTOREFERAT ROZPRAWY DOKTORSKIEJ ZATYTUŁOWANEJ:

**Theoretical description of ultracold strontium molecules in an optical lattice:
control of photodissociation and interpretation of molecular clock experiments**

Tytuł w języku polskim:

**Teoretyczny opis ultrazimnych cząsteczek strontu w sieci optycznej: kontrola
fotodysocjacji i interpretacja eksperymentów z zegarem molekularnym**

Promotor:

prof. dr hab. Robert Moszyński

Ultrazimne cząsteczki, czyli cząsteczki schłodzone do temperatury poniżej 1 mK, są przedmiotem intensywnych badań interdyscyplinarnych. Ich własności mają charakter czysto kwantowy. Postęp w dziedzinie ultrazimnych cząsteczek jest napędzany przez ich zróżnicowane zastosowania. Obejmują one spektroskopię bardzo wysokiej rozdzielczości, poszukiwanie nowej fizyki poza modelem standardowym, badania zderzeń i reakcji chemicznych oraz ich kontrolę, a także symulatory i komputery kwantowe. Aby interpretować wyniki niezwykle dokładnych pomiarów w reżimie ultraniskich temperatur, niezbędny jest ciągły rozwój metod teoretycznych. Dokładność różnych modeli teoretycznych może być testowana poprzez porównanie wyników obliczeń z wynikami pomiarów. Z kolei obliczenia parametrów spektroskopowych i rozproszeniowych są często niezbędne w projektowaniu eksperymentów i zrozumieniu ich rezultatów.

Przedmiotem rozprawy doktorskiej jest opis teoretyczny ultrazimnego dimeru strontu, w szczególności jego fotodysocjacji i pomiarów spektroskopowych wysokiej precyzji przy użyciu zegara molekularnego. Badania były realizowane we współpracy z zespołem eksperymentalnym prof. Tanyi Zelevinsky z Uniwersytetu Columbia w Nowym Jorku. Mimo, że przykłady numeryczne dotyczą cząsteczki Sr₂, stosowane metody są uniwersalne, zaś wnioski mogą być rozszerzone na inne grupy cząsteczek.

Prowadzenie fotodysocjacji w ultrazimnych temperaturach pozwala na pełną kontrolę nad stanami kwantowymi reagentów. Stwarza to niepowtarzalną okazję, aby zbadać zależność rozkładu kąтового zdysocjowanych atomów od stanu początkowego cząsteczek i właściwości lasera. Dla bardzo niskich energii konieczne jest zastosowanie opisu kwantowego przekroju czynnego na fotodysocjację. Wyniki dla wyższych energii pozwalają na wprowadzenie i przetestowanie zróżnicowanych modeli kwaziklasycznych. W pracy doktorskiej badane jest przejście między dwoma reżimami energetycznymi: kwantowym i kwaziklasycznym. Zademonstrowano zbieżność

rozkładów kątowych zdysocjowanych atomów dla energii lasera przekraczających wszystkie bariery energetyczne prowadzonej reakcji. Zaskakująca niezgodność szeroko stosowanego modelu kwaziklasycznego z obserwacjami eksperymentalnymi nawet dla wysokich energii została wyjaśniona przez uwzględnienie bozonowej lub fermionowej statystyki spinowej jąder zdysocjowanych atomów. Zaproponowane rozszerzenie modelu kwaziklasycznego w pełni wyjaśniło wyniki eksperymentalne.

Podstawowym narzędziem kontroli stanów molekularnych i reakcji chemicznych w reżimie ultrazimnym jest zewnętrzne pole elektryczne lub magnetyczne. Sprzężenia Zeemana, obecne w zewnętrznym polu magnetycznym, zaburzają reguły wyboru i stymulują przejścia do wyższych stanów rotacyjnych. W prezentowanej rozprawie wyprowadzono kwantowy model fotodysocjacji w zewnętrznym polu magnetycznym. W pełni wyjaśnia on nietypowe obserwacje eksperymentalne przez uwzględnienie sprzężeń rotacyjnych Zeemana i rozszczepienia stanów atomowych. Obliczenia okazały się niezbędne, aby przeprowadzić ilościową analizę przejść do różnych stanów rotacyjnych oraz zrozumieć ewolucję obrazów fotodysocjacji ze zwiększającym się polem magnetycznym i energią lasera napędzającego dysocjację.

Optyczne zegary atomowe są jednymi z najdokładniejszych urządzeń pomiarowych znanych ludzkości. Zegary molekularne prawdopodobnie ich nie dościgną. Jednakże mają one własne unikalne zastosowania. Obejmują one testy zmian w czasie stałych fundamentalnych, poszukiwania nowych sił zależnych od masy czy badanie oddziaływań międzyatomowych z uwzględnieniem efektów relatywistycznych i elektrodynamiki kwantowej. Cząsteczki są bardziej złożonymi obiektami niż atomy, a wykorzystanie ich drgań i rotacji stwarza nowe możliwości układów eksperymentalnych. Zespół prof. Zelevinsky zaprezentował pierwszy na świecie zegar molekularny oparty na stanach wibracyjnych dimeru strontu. Opis teoretyczny tego zegara jest kolejną ważną częścią prezentowanej rozprawy. Obejmuje on obliczenia czasów życia stanów molekularnych, polaryzowalności, współczynników rozpraszania i wpływu promieniowania ciała doskonale czarnego na częstotliwość zegara.

Niezależne od stanu, tak zwane magiczne pułapkowanie było kluczowym pomysłem dla rozwoju zegarów wysokiej precyzji. Polega ono na takim doborze częstotliwości pułapkującego lasera, aby przesunięcia Starka stanów zegarowych były równe. Dla badanego zegara molekularnego magiczne pułapkowanie jest osiągnięte poprzez wybór częstości lasera w pobliżu rezonansu między niższym stanem zegarowym a wybranym stanem wzbudzonym. Aby zoptymalizować ten wybór, w rozprawie przedstawiono nowy model struktury elektronowej stanów wzbudzonych. Łączy on obliczenia ab initio wysokiej dokładności z eksperymentalnymi energiami i siłami przejść. Jego dokładność została zademonstrowana zarówno dla stanów głęboko związanych, jak i podprogowych. Nowy model pozwolił usprawnić eksperyment poprzez wydłużenie czasu koherencji układu zegarowego.

Praca doktorska została napisana w języku angielskim. Pięć artykułów badawczych opublikowanych w międzynarodowych czasopismach naukowych (*Nature Physics*, *Physical Review Letters*, *Physical Review A*) stanowi rdzeń rozprawy. Zawierają one dokładny opis otrzymanych wyników i ich zestawienie z eksperymentem.