

## AUTOREFERAT

### I. IMIĘ I NAZWISKO

**Michał Tomza**

urodzony 27 września 1987

### II. POSIADANE DYPLOMY I STOPNIE NAUKOWE

- **Doktor nauk chemicznych w zakresie chemii**

Data: 24 czerwca 2014

Tytuł rozprawy: *Quantum dynamics and control of ultracold molecules in external fields*

Promotorzy: prof. dr hab. Robert Moszyński oraz prof. dr Christiane Koch

Jednostka naukowa: Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski oraz Institut für Physik, Universität Kassel w Niemczech (*cotutelle*)

- **Magister chemii**

Data: 4 września 2009

Tytuł pracy: *Dwufotonowa fotoasocjacja zimnych atomów w femtosekundowym polu laserowym*

Promotor: prof. dr hab. Robert Moszyński

Jednostka naukowa: Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski

### III. INFORMACJE O DOTYCHCZASOWYM ZATRUDNIENIU W JEDNOSTKACH NAUKOWYCH

- **Adiunkt naukowy**, od grudnia 2017  
Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski
- **Naukowiec wizytujący**, listopad 2017 – grudzień 2017  
ITAMP, Harvard University, Cambridge, MA, USA
- **Adiunkt naukowy**, listopad 2016 – listopad 2017  
Centrum Nowych Technologii, Uniwersytet Warszawski
- **Staż podoktorski**, listopad 2014 – listopad 2016  
ICFO - Institut de Ciències Fotòniques, Barcelona, Hiszpania
- **Staż podoktorski**, październik 2014  
JILA, University of Colorado at Boulder, CO, USA
- **Staż podoktorski**, lipiec 2014 – sierpień 2014  
University of British Columbia, Vancouver, Kanada
- **Doktorant**, kwiecień 2011 – czerwiec 2014  
Institut für Physik, Universität Kassel w Niemczech
- **Doktorant**, październik 2009 – czerwiec 2014  
Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski

IV. WSKAZANIE OSIĄGNIĘCIA WYNIKAJĄCEGO Z ART. 16 UST. 2 USTAWY Z DNIA 14 MARCA 2003 R. O STOPNIACH NAUKOWYCH I TYTULE NAUKOWYM ORAZ O STOPNIACH I TYTULE W ZAKRESIE SZTUKI (Dz. U. 2016 r. poz. 882 ze zm. w Dz. U. z 2016 r. poz. 1311.):

#### A. TYTUŁ OSIĄGNIĘCIA NAUKOWEGO

Cykl publikacji pt.:

*Oddziaływania i zderzenia pomiędzy ultrazimnymi atomami, jonami i cząsteczkami*

#### B. LISTA PUBLIKACJI WCHODZĄCYCH W SKŁAD OSIĄGNIĘCIA

(odwrotny porządek chronologiczny)

- [H1] L. Tanzi, C. R. Cabrera, J. Sanz, P. Cheiney, **M. Tomza**, L. Tarruell, *Feshbach resonances in potassium Bose-Bose mixtures*, Physical Review A 98, 062712 (2018).
- [H2] K. Zaremba-Kopczyk, P. S. Żuchowski, **M. Tomza**, *Magnetically tunable Feshbach resonances in ultracold gases of europium atoms and mixtures of europium and alkali-metal atoms*, Physical Review A 98, 032704 (2018).
- [H3] A. Dawid, M. Lewenstein, **M. Tomza**, *Two interacting ultracold molecules in a one-dimensional harmonic trap*, Physical Review A 97, 063618 (2018), wyróżniony jako Editors' Suggestion.
- [H4] T. Schmid, C. Veit, N. Zuber, R. Löw, T. Pfau, M. Tarana, **M. Tomza**, *Rydberg molecules for ion-atom scattering in the ultracold regime*, Physical Review Letters 120, 153401 (2018).
- [H5] H. Fürst, T. Feldker, N. Ewald, J. Joger, **M. Tomza**, R. Gerritsma, *Dynamics of a single ion spin impurity in a spin-polarized atomic bath*, Physical Review A 98, 012713 (2018).
- [H6] J. Joger, H. Fürst, N. Ewald, T. Feldker, **M. Tomza**, R. Gerritsma, *Observation of collisions between cold Li atoms and Yb<sup>+</sup> ions*, Physical Review A 96, 030703(R) (2017), Rapid Communication.
- [H7] **M. Tomza**, *Cold interactions and chemical reactions of linear polyatomic anions with alkali-metal and alkaline-earth-metal atoms*, Physical Chemistry Chemical Physics 19, 16512 (2017).
- [H8] B. Midya, **M. Tomza**, R. Schmidt, M. Lemeshko, *Rotation of cold molecular ions inside a Bose-Einstein condensate*, Physical Review A 94, 041601(R) (2016), Rapid Communication.
- [H9] **M. Tomza**, *Ultracold magnetically tunable interactions without radiative charge transfer losses between Ca<sup>+</sup>, Sr<sup>+</sup>, Ba<sup>+</sup>, and Yb<sup>+</sup> ions and Cr atoms*, Physical Review A 92, 062701 (2015).
- [H10] **M. Tomza**, *Energetics and control of ultracold isotope-exchange reactions between heteronuclear dimers in external fields*, Physical Review Letters 115, 063201 (2015).

Szczegółowe informacje dotyczące mojego wkładu do powyższych publikacji zamieszczono w Załączniku nr 4.

Przedstawiony autoreferat jest tłumaczeniem wersji oryginalnie napisanej w języku angielskim, z którą czytelnik może zapoznać się w Załączniku nr 3.



## C. OMÓWIENIE CELU NAUKOWEGO WW. PRAC I OSIĄGNIĘTYCH WYNIKÓW WRAZ Z OMÓWIENIEM ICH EWENTUALNEGO WYKORZYSTANIA

Zimne i ultrazimne układy cieszą się obecnie ogromnym zainteresowaniem, ponieważ kwantowa natura świata wyraźnie manifestuje się w ultraniskich temperaturach, czyli temperaturach poniżej 1 milikelwina, a badania nad układami tego typu dają nowy wgląd w kwantową teorię materii i oddziaływań materii ze światłem [1–3]. W tym kontekście wszystkie dziesięć artykułów [H1]-[H10], które stanowią prezentowane osiągnięcie, opisuje oddziaływania i zderzenia między ultrazimnymi atomami, jonami i cząsteczkami, wraz z ich potencjalnymi zastosowaniami i implikacjami dla współczesnych prac eksperymentalnych. Dokładniej, artykuły [H1], [H5] i [H6] przedstawiają połączone wyniki eksperymentalne i teoretyczne, w których opracowana teoria kierowała i pomagała interpretować prace eksperymentalne. Artykuł [H4] jest propozycją teoretyczną mającą na celu dostarczenie wskazówek dla trwających prac eksperymentalnych, natomiast artykuły [H2], [H3], [H7], [H8], [H9] i [H10] proponują i szczegółowo analizują nowe ultrazimne układy gotowe do wdrożenia w nowoczesnych eksperymentach w najbliższej przyszłości. W przedstawionych pracach szczególną uwagę zwrócono na uwzględnienie możliwości eksperymentalnych i ograniczeń technicznych.

Tematy prezentowanych artykułów nakładają się na siebie i uzupełniają na kilku poziomach, w tym w stosowanych metodach teoretycznych, implementacjach fizycznych i implikacjach eksperymentalnych, niemniej jednak można wyróżnić następujące cztery największe kategorie:

- ultrazimne układy jon-atom: [H4], [H5], [H6], [H7], [H8], [H9],
- ultrazimne układy cząsteczkowe: [H3], [H4], [H7], [H8], [H10],
- kontrola kwantowa ultrazimnych układów: [H1], [H2], [H3], [H4], [H4], [H5], [H6], [H10],
- magnetycznie przestrajalne rezonanse Feshbacha: [H1], [H2], [H5], [H9].

Struktura tej części autoprezentacji jest następująca. Rozdział 1 to wprowadzenie do dziedziny ultrazimnych atomów, jonów i cząsteczek. Rozdział 2 opisuje metody teoretyczne stosowane w prezentowanej serii artykułów. Rozdział 3 przedstawia wyniki artykułów [H1]-[H10]. Ostatnia sekcja 4 podsumowuje prezentację wyników.

Dodatkowo zachęcam czytelnika do zapoznania się z artykułem przeglądowym pod tytułem *Cold hybrid ion-atom systems* [O1], który obejmuje znaczną część metod teoretycznych i układów stosowanych i prezentowanych w artykułach [H1]-[H10]. Artykuł ten, zaakceptowany do publikacji w *Reviews of Modern Physics*, został przygotowany pod moim nadzorem i z moim dominującym wkładem.

### 1. Wstęp do ultrazimnych atomów, jonów i cząsteczek

Rozwój technik laserowych i metod chłodzenia doprowadził do narodzin i wielu sukcesów dziedziny zimnej i ultrazimnej materii w ostatnich dziesięcioleciach [4, 5]. Ultrazimne gazy są idealnymi układami do inżynierii wysoce nietrywialnych stanów materii, a tym samym do symulacji kwantowych i pomiarów precyzyjnych, ponieważ pozwalają na przygotowanie, manipulowanie i mierzenie z wielką dokładnością silnie oddziałujących układów kwantowych [6–9]. Po wielu spektakularnych sukcesach w badaniach nad ultrazimnymi atomami społeczność naukowa zwróciła ostatnio uwagę na badania nad ultrazimnymi cząsteczkami, atomami Rydberga, jonami oraz ich mieszaninami z ultrazimnymi atomami. Takie mieszaniny mają bogatszą strukturę wewnętrzną w porównaniu z atomami, co pozwala mieć nadzieję na ich nowe ekscytujące zastosowania [10–12].

Ultrazimne pułapowane atomy i polarne cząsteczki są fascynującymi i użytecznymi układami, których oddziaływania, strukturę i geometrię można potencjalnie kontrolować w szerokim zakresie parametrów. Można je wykorzystać do symulacji wielu zjawisk kwantowych istotnych dla fizyki



materii skondensowanej, naśladując zachowanie interesujących układów. Pierwsze symulacje kwantowe podstawowych zjawisk kwantowych z ultrazimnymi atomami w sieciach optycznych zostały już zademonstrowane [8, 13–16]. Zaproponowano również ultrazimne polarne cząsteczki w sieciach optycznych w celu realizacji dipolowych faz kwantowych [17] i modeli spinowych [18], symulacji fizyki materii skondensowanej [8] lub kwazicząstek [19], implementacji obliczeń kwantowych [20], pomiarów precyzyjnych [21, 22] i wiele innych [10]. Produkcja ultrazimnych gazów cząsteczkowych o dużej gęstości [23–28] pozwoliła na realizację przełomowych eksperymentów nad kontrolowanymi reakcjami chemicznymi [29–32]. Ograniczenie wymiarowości ultrazimnego gazu cząsteczkowego [33] i obserwacja dipolowych oddziaływań wymiennych między cząsteczkami polarnymi ograniczonymi siecią [34] otworzyły drogę do symulacji kwantowych egzotycznych faz kwantowych i innych zjawisk fizyki kwantowej wielu ciał.

Pułapkowane jony atomowe są wysoce kontrolowanymi układami z silnymi oddziaływaniami, a zatem znajdują wiele zastosowań, na przykład w pomiarach precyzyjnych, symulacjach kwantowych, obliczeniach kwantowych i metrologii kwantowej [35–37]. Rozwój metod chłodzenia laserowego pułapkowanych jonów atomowych do stanu podstawowego [38] otworzył drogę do przełomowych eksperymentów pozwalających na pomiary i manipulacje poszczególnymi układami kwantowymi. Teoretyczna propozycja Ignacio Ciraca i Petera Zollera z 1995 r. pokazała, że komputer kwantowy może zostać zaimplementowany przy użyciu zimnych jonów atomowych złapanych w liniowej pułapce jonowej i oddziałujących z wiązkami laserowymi [39]. Ta propozycja przyspieszyła badania nad schłodzonymi laserowo pułapkowanymi jonami atomowymi. Przy ich pomocy zrealizowano symulacje kwantowe podstawowej bramki logiki kwantowej [40], bramki Ciraca-Zollera [41], stanów splecionych [42], równania Diraca [43], otwartych układów kwantowych [44], algorytmu Deutsch-Jozsa [45], kwantowej korekcji błędów [46], skalowalnego algorytmu Shora [47], czy uniwersalnego cyfrowego symulatora [48].

Atom wzbudzony do stanu Rydberga ma ogromną elektryczną dipolową polaryzowalność ( $\sim n^7$ , gdzie  $n$  jest główną liczbą kwantową) ze względu na słabe wiązanie i bardzo duży rozmiar ( $\sim n^2$ ) orbitalu elektronu Rydberga [49]. Ta ogromna polaryzowalność powoduje bardzo silne oddziaływania międzyatomowe typu van der Waalsa lub dipol-dipol między dwoma atomami wzbudzonymi do stanów Rydberga. Te bardzo silne oddziaływania można wykorzystać do kontrolowania ultrazimnych zderzeń między atomami. Na przykład pierwsze szybkie bramki kwantowe dla neutralnych atomów zaproponowano przy użyciu tej techniki [50]. Silne i dalekozasięgowe oddziaływania między atomami w stanie Rydberga, przesuwając poziomy energetycznych, skutkują również innym ogólnym zjawiskiem blokady wzbudzeń Rydberga, która tłumy możliwość wybudzenia dwóch pobliskich atomów w tym samym czasie [51, 52]. Dlatego atomowe układy Rydberga znajdują wiele zastosowań w manipulowaniu stanami fotonów w zespołach atomowych [53], a także w symulacjach kwantowych fizyki wielu ciał [54] i obliczeniach kwantowych [55]. Zrealizowano również pierwsze symulatory kwantowe oparte na wzbudzeniach Rydberga w układach zbudowanych atom po atomie [56, 57]. Innym interesującym kierunkiem badawczym jest tworzenie cząsteczek Rydberga o bardzo dużym rozmiarze [58, 59]. Zatem kwantowe mieszaniny atomów z atomami Rydberga mają bardzo interesującą i zróżnicowaną naturę.

W ostatnim czasie hybrydowe układy schłodzonych laserowo pułapkowanych jonów i ultrazimnych atomów połączonych w jednym układzie doświadczalnym stały się nową platformą dla badań podstawowych w dziedzinie fizyki i chemii kwantowej [60]. Układy te łączą najlepsze cechy dwóch dobrze ugruntowanych pól: pułapkowanych jonów [38] i ultrazimnych atomów [7]. Jon może zostać uwięziony w pułapce Paula, ale minimalna możliwa energia zderzeń jon-atom w tej pułapce jest ograniczona do kilku  $\mu\text{K}$  przez mikroruch indukowany przez częstotliwość radiową [61, 62]. Na szczęście opracowano także pułapki dipolowe na jony, otwierając drogę do jeszcze zimniejszych układów jon-atom [63–65]. Ich potencjalne zastosowania rozciągają się od kontrolowanych ultrazim-



nych zderzeń i reakcji chemicznych [66–69], po symulacje kwantowe fizyki ciała stałego [70, 71] i obliczenia kwantowe [72]. Zimne jony molekularne mogą być tworzone z zimnych mieszanin jonów atomowych i atomów [O4] lub mogą być schładzane od temperatury pokojowej za pomocą lasera, gazu buforowego lub współchłodzenia [73–75]. Potencjalne zastosowania jonów molekularnych obejmują precyzyjne pomiary [76, 77], zimną chemię kontrolowaną [78, 79] oraz nowe symulacje kwantowe. Niedawno rozpoczęto realizację pierwszych eksperymentów łączących proste dwuatomowe jony molekularne z ultrazimnymi atomami.

## 2. Metodologia badań

Badania, które stanowią prezentowane osiągnięcie, miały na celu opracowanie nowych koncepcji, metod i narzędzi do badań teoretycznych i eksperymentalnych ultrazimnych mieszanin kwantowych atomów, jonów i cząsteczek - układów, które są interesujące z fundamentalnego punktu widzenia, ale niezbyt dobrze zbadane. Aby osiągnąć planowane cele, wykorzystaliśmy najnowocześniejsze metody fizyki molekularnej i chemii kwantowej, a także opracowaliśmy nowe programy, modele i metody teoretyczne, gdy było to potrzebne.

Krzywe energii potencjalnej, dipolowe elektryczne momenty przejścia i elementy macierzy sprzężenia spin-orbita dla wybranych układów cząsteczkowych obliczono przy użyciu najnowocześniejszych metod *ab initio* chemii kwantowej, uwzględniających zarówno statyczną, jak i dynamiczną energię korelacji i efekty relatywistyczny [80, 81]. Aby zbadać strukturę elektronową zamkniętopowłokowych jak również wysoko-spinowych otwarto-powłokowych układów w stanie podstawowym, wykorzystaliśmy metodę sprzężonych klasterów ograniczoną do pojedynczych, podwójnych i nieiteracyjnych potrójnych wzbudzeń, CCSD(T) [82, 83]. Dipolowe elektryczne momenty przejścia obliczono również przy użyciu metod sprzężonych klasterów, jeśli to możliwe, np. stosując teorię odpowiedzi liniowej [81]. We wszystkich innych przypadkach, zwłaszcza dla elektrycznych dipolowych momentów przejścia i elementów macierzy sprzężenia spin-orbita, zastosowaliśmy wieloreferencyjną metodę oddziaływania konfiguracji ograniczoną do pojedynczych i podwójnych wzbudzeń, MR-CISD [84]. Obliczenia struktury elektronowej wykonano za pomocą pakietu programów do obliczeń *ab initio* MOLPRO [85].

Energie oddziaływania uzyskano za pomocą metody supermolekularnej z błędem superpozycji bazy skorygowanym za pomocą korekcji przeciwwagi [86]  $V_{A+B} = E_{A+B} - E_A - E_B$ , gdzie  $E_{A+B}$  oznacza całkowitą energię oddziałującego kompleksu, a  $E_A$  i  $E_B$  są całkowitymi energiami monomerów obliczonymi w bazie dimeru. We wszystkich obliczeniach używaliśmy dużych baz i dużych przestrzeni aktywnych, a wyniki były ekstrapolowane do granicy bazy zupełnej, jeśli było to możliwe. Lekkie atomy zostały opisane za pomocą rozszerzonych baz Dunninga (aug-cc-pVnZ) z  $n$  między 3 a 5. Inne atomy metali alkalicznych i metali ziem alkalicznych zostały opisane z małymi relatywistycznymi pseudopotencjałami (ECP), aby zastąpić elektrony wewnętrznych powłok [87]. Traktowaliśmy więc ciężkie atomy metali alkalicznych i metali ziem alkalicznych jako układy odpowiednio 9 i 10 elektronów. Zostały one opisane za pomocą baz uzyskanych używając baz zaserwowanych przez autorów pseudopotencjałów, ale powiększonych i zoptymalizowanych przez nas w poprzednich projektach [O14, O10, O8, O7]. Skalarne efekty relatywistyczne na ciężkich atomach zostały uwzględnione przez zastosowane pseudopotencjały. Zastosowanie pseudopotencjałów pozwoliło nam na użycie większych baz do opisanie elektronów walencyjnych i modelowania gęstości elektronów na powłokach wewnętrznych tak dokładnie, jak wysokiej jakości obliczenia atomowe zastosowane do dopasowania pseudopotencjałów. We wszystkich obliczeniach wykorzystano pseudopotencjały z biblioteki rozwijanej w Stuttgarcie [87].

Dalekozasięgowe współczynniki oddziaływania, które są szczególnie istotne dla zimnej fizyki i chemii, uzyskano wykorzystując rachunek zaburzeń [88]. Potencjał oddziaływania między jonom



atomowym a atomem w elektronowym stanie podstawowym bez orbitalnego momentu pędu, na dużych odległościach międzyatomowych  $R$ , zadany jest przez

$$V(R) = -\frac{C_4^{\text{ind}}}{R^4} - \frac{C_6^{\text{ind}}}{R^6} - \frac{C_6^{\text{disp}}}{R^6} + \dots, \quad (1)$$

gdzie wiodące dalekozasięgowe współczynniki oddziaływania indukcyjnego to  $C_4^{\text{ind}} = \frac{1}{2}q^2\alpha_{\text{atom}}$  i  $C_6^{\text{ind}} = \frac{1}{2}q^2\beta_{\text{atom}}$ , gdzie  $\alpha_{\text{atom}}$  jest statyczną polaryzowalnością dipolową atomu,  $q$  jest ładunkiem jonu i  $\beta_{\text{atom}}$  to statyczna elektryczna polaryzowalność kwadrupolowa atomu. Wiodącym dalekozasięgowym współczynnikiem oddziaływania dyspersyjnego jest  $C_6^{\text{disp}} = \frac{3}{\pi} \int_0^\infty \bar{\alpha}_{\text{jon}}(i\omega)\bar{\alpha}_{\text{atom}}(i\omega)d\omega$ , gdzie  $\alpha_{\text{atom/ion}}(i\omega)$  to polaryzowalność dynamiczna atomu/ionu od częstotliwości urojonej. Jeśli atom ma bardziej złożoną strukturę i ma niezerowy orbitalny moment pędu, to w równaniu (2) pojawiają się dodatkowe człony, takie jak  $-C_3^{\text{elst}}/R^3$  i  $-C_5^{\text{elst}}/R^5$ , które opisują oddziaływanie ładunek-kwadrupol i ładunek-heksadekapol, odpowiednio [89]. Dwa wiodące człony potencjału oddziaływania dalekozasięgowego między dwuatomowym jonem molekularnym a atomem wynoszą

$$V(R, \theta) = -\frac{C_4^{\text{ind}}}{R^4} - \frac{C_5^{\text{ind}}}{R^5} \cos \theta + \dots, \quad (2)$$

gdzie  $C_5^{\text{ind}} = 2\alpha_{\text{atom}}qd_{\text{jon}}$ , gdzie  $d_{\text{jon}}$  jest momentem dipolowym jonu molekularnego.

Statyczne elektryczne właściwości monomerów obliczono metodą skończonych pól w połączeniu z odpowiednimi metodami kwantowo-chemicznymi. Dynamiczne polaryzowalności przy urojonej częstotliwości zostały zaczerpnięte z poprzednich dokładnych obliczeń atomowych (np. z Ref. [90] dla atomów metali alkalicznych i metali ziem alkalicznych) lub uzyskane przy użyciu propagatora polaryzacji w ramach metody sprzężonych klastrów [91, 92] dla układów o zamkniętej powłoce i formalizmu sumy po stanach dla układów otwarto-powłokowych.

Dynamika ruchu jąder dwóch zderzających się atomów została opisana przez rozwiązanie równania Schrödingera z odpowiednim hamiltonianem. Ogólny hamiltonian opisujący względny ruch atomu  $A$  i atom  $B$  ma postać [O4, O5]

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{R} \frac{d^2}{dR^2} R + \frac{\hat{l}^2}{2\mu R^2} + \sum_{S, M_S} V_S(R) |S, M_S\rangle \langle S, M_S| + V^{ss}(R) + \hat{H}_A + \hat{H}_B, \quad (3)$$

gdzie  $\mu$  jest masą zredukowaną,  $R$  jest odległością międzyjądrową,  $\hat{l}$  jest operatorem rotacyjnego momentu pędu i  $V_S(R)$  to krzywa energii potencjalnej dla stanu z całkowitym spinem elektronowym  $S$ .  $V^{ss}(R)$  opisuje dipolowe oddziaływanie spin-spin odpowiedzialne za relaksację dipolową [93]. Atomowe hamiltoniany,  $\hat{H}_j$  ( $j = A, B$ ), w tym oddziaływania Zeemana i nadsubtelne, zadane są przez

$$\hat{H}_j = \zeta_j \hat{i}_j \cdot \hat{s}_j + \left( g_e \mu_B \hat{s}_{j,z} + g_j \mu_N \hat{i}_{j,z} \right) B_z \quad (4)$$

gdzie  $\hat{s}_j$  i  $\hat{i}_j$  to operatory elektronowego i jądrowego spinu,  $\zeta_j$  jest stałą sprzężenia nadsubtelnego,  $g_{e/j}$  to elektronowe i jądrowe czynniki  $g$ , a  $\mu_{B/N}$  to magnetony Bohra i jądrowy.

Związane stany ro-wibracyjne dla hamiltonianu z równania (3) obliczono przy użyciu dokładnej diagonalizacji z dyskretną reprezentacją odległości międzyatomowych na siatce Fouriera z adaptowanym rozmiarem kroku [94–96] wraz ze spinowymi i kątowymi stopnia swobody reprezentowanymi we właściwie symetryzowanej bazie harmonik sferycznych. Obliczone stany własne wykorzystano do otrzymania czynników Francka-Condon i współczynników Einsteina.

Stany i właściwości rozproszeniowe zostały obliczone przy użyciu kodu napisanego w Fortranie 95. Całkowite rozproszeniowe funkcje falowe zostały skonstruowane w bazie iloczynowej, zakładając zachowanie rzutu całkowitego momentu pędu. Zrealizowano obliczenia nieadiabatyczne (poza przybliżeniem Borna-Oppenheimera) dla kilku stanów elektronowych sprzężonych przez strukturę



nadształną. Użytych funkcjach bazy były iloczyny stanów własnych związane z różnymi momentami pędu obecnymi w układzie (rotacyjnym, jądrowym, spinowy). Sprzężone równania różniczkowe zostały rozwiązane przy użyciu znormalizowanego propagatora Numerova [97] ze zmiennym krokiem. Stosunki funkcji falowej propagowano do dużych odległości międzycząsteczkowych, przekształcano do bazy diagonalnej, i obliczano macierze  $K$  i  $S$  poprzez nałożenie odpowiednich rozpraszających warunków brzegowych z użyciem funkcji Bessela. Długości rozpraszania, elastycznie, nieelastycznie i reaktywne przekroje czynne zostały uzyskane z macierzy  $S$ .

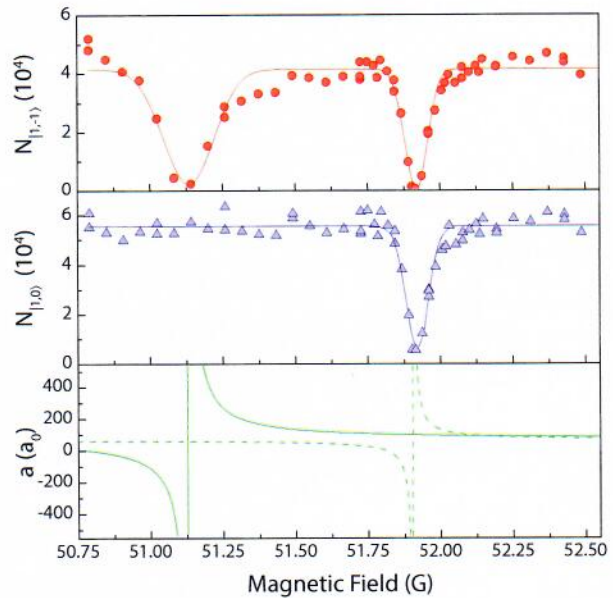
Ewolucja w czasie dla hamiltonianów niezależnych od czasu została zrealizowana przez propagację w bazie stanów własnych uzyskanych w dokładnej diagonalizacji. Ewolucja w czasie dla zależnych od czasu hamiltonianów z zależnymi od czasu polami zewnętrznymi była badana za pomocą operatora podziału i propagatora Czebyszewa [98].

### 3. Opis uzyskanych wyników

#### Rezonanse Feshbacha w mieszaninach bozonowo-bozonowych potasu

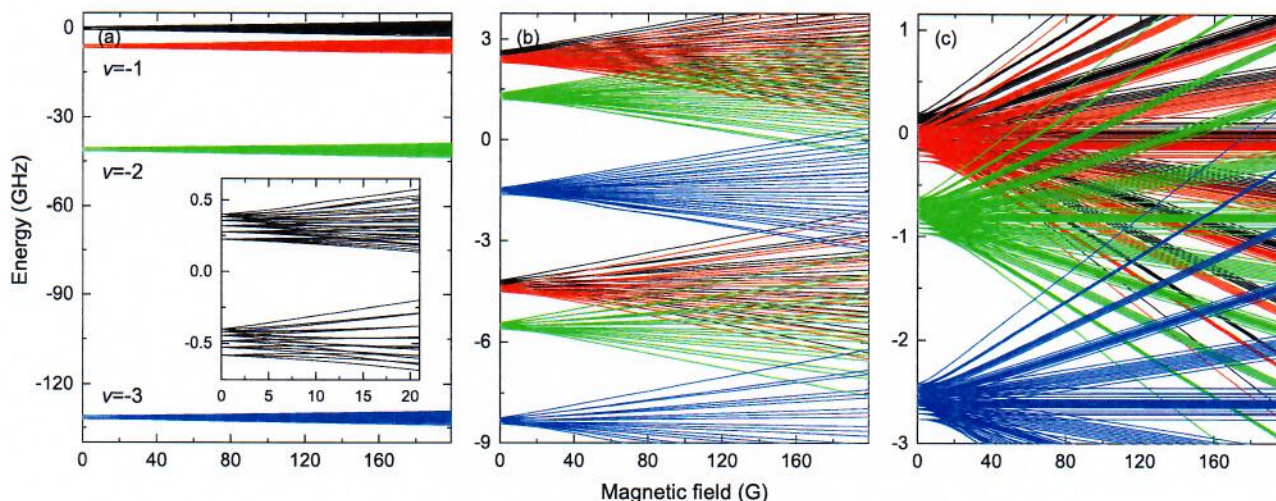
Magnetycznie przestrajalne rezonanse Feshbacha są uniwersalnym i użytecznym narzędziem do kontrolowania właściwości zderzeniowych w ultrazimnych gazach kwantowych [99, 100]. W ciągu ostatnich 20 lat umożliwiły one badanie bogactwa zjawisk kilku- i wieloatomowych. Kluczowe przykłady obejmują magnetoasocjację ultrazimnych cząsteczek Feshbacha [101], obserwację stanów Efimova [102] oraz badanie układów silnie oddziałujących, których najlepszym przykładem są gazy oddziałujące unitarnie [103].

W artykule [H1], we współpracy z grupą eksperymentalną prof. dr. Letici Tarruell z Instytutu Fotoniki w Barcelonie, przeprowadziliśmy wszechstronne eksperymentalne i teoretyczne badania właściwości ultrazimnego rozpraszania różnych mieszanin bozonowo-bozonowych potasu. Znaleźliśmy 20 wcześniej nie obserwowanych rezonansów Feshbacha w mieszaninie  $^{39}\text{K}$ - $^{41}\text{K}$  i potwierdziliśmy ważność potencjałów modelowych zaproponowanych wcześniej dla tej kombinacji izotopowej [104]. Przykładowe porównanie uzyskanych wyników do doświadczalnych i teoretycznych przedstawiono na Rys. 1. Na poziomie dokładności eksperymentu i teorii stanowiło to test poprawności przybliżenia Borna-Oppenheimera dla zderzeń atomów potasu. Dla  $^{41}\text{K}$  zidentyfikowaliśmy nowy międzystanowy rezonans Feshbacha, który daje dostęp do dwuskładnikowych gazów bozonowych z odpychającymi oddziaływaniami wewnątrzstanowymi i przestrajalnymi międzystanowymi. Dla atomów  $^{41}\text{K}$  zmierziliśmy energię wiązania stanu molekularnego odpowiedzialnego za mię-



Rysunek 1: Rezonanse Feshbacha dla zderzeń w kanałach  $|1, -1\rangle + |1, -1\rangle$  oraz  $|1, 0\rangle + |1, -1\rangle$ . Górny i środkowy panel: obserwowane eksperymentalnie straty atomów dla stanów  $|1, -1\rangle$  (czerwone kółka) i  $|1, 0\rangle$  (niebieskie trójkąty). Linia ciągła jest empirycznym dopasowaniem Gaussa używanym do wyodrębnienia pozycji rezonansów. Panel dolny: długości rozpraszania dla  $|1, -1\rangle + |1, -1\rangle$  (linia ciągła) i  $|1, -1\rangle + |1, 0\rangle$  (linia przerywana) przewidywane według naszych obliczeń CC. Długość rozpraszania dla  $|1, 0\rangle + |1, 0\rangle$  nie zmienia się w tym zakresie pola magnetycznego i pozostaje blisko wartości tła  $\sim 65a_0$ . Z artykułu [H1].





Rysunek 2: Poziomy energii nadsubtelnej dla mieszanin atomów (a)  $^{153}\text{Eu}+^7\text{Li}$ , (b)  $^{153}\text{Eu}+^{87}\text{Rb}$ , oraz (c)  $^{153}\text{Eu}+^{151}\text{Eu}$  z rzutem całkowitego momentu pędu  $M_{\text{tot}} = 0$  jako funkcja pola magnetycznego. Czarne linie pokazują progi atomowe, podczas gdy kolorowe linie odpowiadają progresji ostatnich trzech najbliższych związanych wibracyjnych poziomów molekularnych dla nieskończenie dużych i ujemnych długości rozpraszania. Z artykułu [H2].

dzystanowy rezonans Feshbacha na  $\sim 114\text{ G}$  [105]. Łącząc obserwacje eksperymentalne, obliczenia kwantowe i modele analityczne, przedstawiliśmy precyzyjną charakterystykę parametrów rezonansu, w tym siłę rezonansu i parametr efektywnego zakresu.

23 rezonanse Feshbacha scharakteryzowane w tej pracy można wykorzystać do ulepszenia modelowego potencjału oddziaływania pomiędzy atomami potasu. Takie wysiłki powinny obejmować również wyniki dla rezonansów w  $^{40}\text{K}$  [106],  $^{41}\text{K}$  [107] oraz  $^{40}\text{K}-^{41}\text{K}$  [108], które zostały zlokalizowane w ostatnich latach, oraz najnowsze pomiary dla gazów jednoskładnikowych  $^{39}\text{K}$  [109, 110]. Ponadto dostrajalność długości rozpraszania dostępna w mieszaninach bozonowo-bozonowych potasu otwiera bogactwo możliwości dla przyszłych badań. Mieszanina  $^{39}\text{K}-^{41}\text{K}$  umożliwia realizację trójskładnikowych gazów Bosego z przestrajalnymi oddziaływaniami, w których przewidziano polarony magnetyczne [111]. W obecności koherentnego sprzężenia, rezonans międzystanowy w  $^{41}\text{K}$  dobrze nadaje się do badania przejścia fazowego paramagnetyczno-ferromagnetycznego i do kontroli oddziaływań w eksperymentach z polami syntetycznymi w wymiarach syntetycznych [112–114]. Wreszcie rezonans międzystanowy w  $^{39}\text{K}$  stanowi idealny układ do obserwacji polaronów bozonowych w silnie oddziałującym reżimie [105]. Przedstawione badania rezonansów Feshbacha były niezbędne dla eksperymentalnej realizacji kwantowych kropelek w mieszaninie kondensatów Bosego-Einsteina w grupie prof. dr Tarruell [115, 116].

## Rezonanse Feshbacha w ultrazimnych gazach atomów Eu oraz mieszaninach Eu i atomów metali alkalicznych

Magnetycznych rezonansów Feshbacha można oczekiwać między dowolnymi atomami o otwartej powłoce, ale pierwsze zastosowania dotyczyły ultrazimnych atomów metali alkalicznych [117]. Niemniej jednak zaobserwowano je także w eksperymentach z ultrazimnymi atomami Cr [118–122], a ostatnio z ultrazimnymi atomami Er i Dy [123–129]. Szczególnie interesujące są gazy ultrazimne atomów dipolowych, ponieważ dzięki nim można uzyskać bogatą fizykę różnych faz kwantowych i modeli spinowych [130, 131]. Dlatego atomy w złożonych stanach elektronowych z dużymi spinowymi i orbitalnymi elektronowymi momentami pędu, takie jak Er i Dy, zostały schłodzone do niskich



i bardzo niskich temperatur. Olbrzymie sukcesy osiągnięto już dzięki tym atomom, aby wspomnieć tylko o obserwacjach chaosu kwantowego w ultrazimnych zderzeniach [132] deformacji powierzchni Fermiego [133], kropel kwantowych [134], niestabilności Rosensweiga [135] i rozszerzonego modelu Bosego-Hubbarda [136]. Dynamika spinowa domieszek w łaźni silnie magnetycznych atomów i fizyka magnetycznego polaronu [111, 137] w takich układach wciąż czekają na realizację.

Atomy Dy i Er są doskonałymi układami do badań opartych na silnych oddziaływaniach dipolowych, niemniej jednak ich bardzo bogate, gęste i chaotyczne widma magnetycznych rezonansów Feshbacha, których nie można uniknąć [129], mogą ograniczyć zastosowania oparte na precyzyjnej kontroli wewnętrznych stopni swobody, takie jak magnetoasocjacja, stabilizacja optyczna do stanów silnie związanych lub badania fizyki polaronów magnetycznych. Zastosowanie ultrazimnych atomów Eu może przynieść rozwiązanie tego problemu.

Dlatego w artykule [H2] zbadaliśmy ultrazimne zderzenia z udziałem atomów Eu jako kolejny przykład lantanowca do realizacji i zastosowania atomowych i molekularnych gazów dipolowych w kwantowej fizyce wielu ciał. Zbadaliśmy przestrajalne magnetycznie rezonanse Feshbacha między ultrazimnymi atomami europu oraz między europem a atomami metali alkalicznymi za pomocą wielokanałowych kwantowych obliczeń rozproszeniowych. Dla ultrazimnych gazów atomów europu rozważaliśmy zarówno homojądrowe  $^{153}\text{Eu}+^{153}\text{Eu}$  i heterojądrowe  $^{151}\text{Eu}+^{153}\text{Eu}$  układy. Obliczenia dla mieszanin europu i atomów metali alkalicznych przeprowadzono dla prototypowych układów  $^{153}\text{Eu}+^{87}\text{Rb}$  oraz  $^{153}\text{Eu}+^7\text{Li}$ . Widmo poziomów struktury nadsubtelnej dla tych mieszanin przedstawiono na Rys. 2. Przeanalizowaliśmy możliwość kontroli właściwości rozproszeniowych, obserwacji kwantowego zachowania chaotycznego i magnetoasocjacji w ultrazimne cząsteczki polarne i paramagnetyczne. Pokazaliśmy, że można oczekiwać przydatnych rezonansów przy eksperymentalnie dostępnych natężeniach pola magnetycznego poniżej 1000 G dla wszystkich badanych kombinacji atomowych. W przypadku mieszanin atomów Eu spodziewane jest bogate spektrum rezonansów w wyniku współzawodnictwa między stosunkowo słabym krótkozasięgowym spinowym oddziaływaniem wymiennym a silnym długozasięgowym magnetycznym oddziaływaniem dipolowym, gdzie oddziaływanie dipolowe indukuje mierzalne rezonanse. Można oczekiwać dużej gęstości rezonansów przy natężeniu pola magnetycznego poniżej 200 G bez wyraźnych znamion chaosu kwantowego. Niniejsze wyniki mogą być przydatne do realizacji i zastosowania atomowych i molekularnych kwantowych gazów dipolowych opartych na atomach europu w fizyce wielu ciał.

## Dwie oddziałujące ultrazimne cząsteczki w jednowymiarowej pułapce harmonicznej

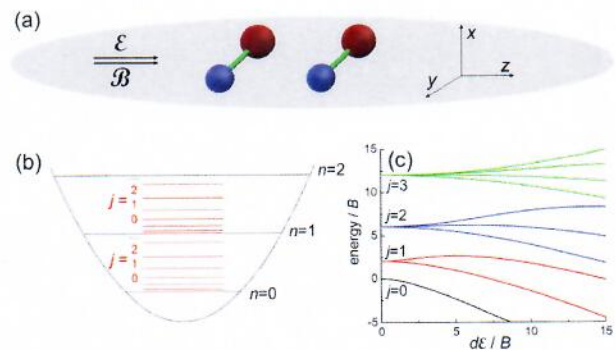
W ostatnim czasie deterministyczne przygotowanie przestrajalnych układów kilku fermionów z całkowitą kontrolą nad liczbą cząstek i ich stanem kwantowym stało się możliwe [138], otwierając drogę do kwantowych symulacji silnie skorelowanych układów kilku ciał. Fermionizacja dwóch rozróżnialnych fermionów [139], tworzenie morza Fermiego [140], parowanie w układach kilku fermionów [141], antyferromagnetyczny łańcuch Heisenberga [142], czy dwa fermiony [143] lub bozony [144, 145] w podwójnej studni zostały eksperymentalnie zbadane w 1D. Z drugiej strony, zrealizowano również tworzenie atom po atomie jedno- i dwuwymiarowych macierzy zimnych atomów [56, 57]. W ten sposób produkcja w pełni kontrolowalnej syntetycznej materii kwantowej może zostać osiągnięta przy użyciu zarówno podejścia top-down, jak i bottom-up.

Możliwości eksperymentalne zapoczątkowały intensywne badania teoretyczne nad układami kilku atomów. Ultrazimne cząsteczki mają znacznie bogatszą strukturę wewnętrzną w porównaniu z atomami [10]. Obejmuje to poziomy rotacyjne i wibracyjne wraz z możliwym trwałym elektrycznym momentem dipolowym. Niedawno podjęto pierwszy krok w kierunku otrzymania układów cząsteczkowych składanych atom po atomie [146] i zastosowano pęsety optyczne do składania

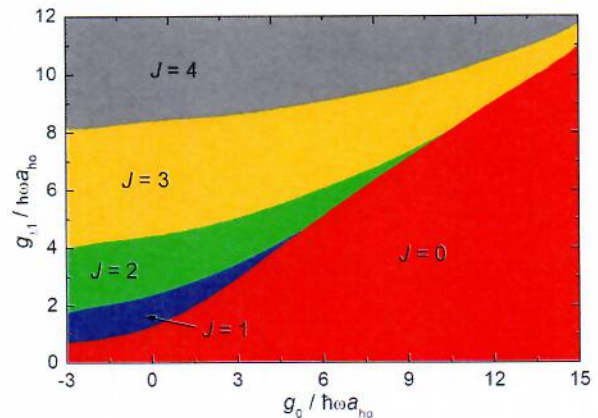


i kontrolowania pojedynczych cząsteczek [147]. Wszystkie powyższe osiągnięcia torują drogę do realizacji i zastosowania molekularnych symulatorów kwantowych budowanych z cząsteczek.

W artykule [H3] zbadaliśmy fundamentalny element konstrukcyjny takiego symulatora, czyli dwie oddziałujące ze sobą cząsteczki polarne uwięzione w jednowymiarowym potencjale harmonicznym (patrz Rys. 3). W naszym modelu opisaliśmy cząsteczki jako rozróżnialne kwantowe rotatory sztywne, które oddziałują w jednowymiarowej pułapce harmonicznej poprzez wielokanałowy dwuciałowy potencjał kontaktowy, uwzględniający krótkozasięgowe izotropowe i anizotropowe oddziaływania międzycząsteczkowe. Szczegółowo przeanalizowaliśmy właściwości takich układów, w tym wzajemne oddziaływanie molekularnej struktury rotacyjnej, oddziaływań anizotropowych, sprzężenia spin-rotacja, zewnętrznych pól elektrycznego i magnetycznego oraz potencjału pułapkowania harmonicznego. Widma energii i stany własne obliczono za pomocą dokładnej diagonalizacji. Starannie zastosowaliśmy kilka przybliżeń potrzebnych do uproszczenia obliczeń oraz oddzielenia wpływu i znaczenia różnych cech struktury molekularnej i oddziaływań międzycząsteczkowych na dynamikę układu. Zbadaliśmy właściwości takiego układu w szerokim zakresie parametrów układu i natężenia pól zewnętrznych. Nasze obliczenia można traktować jako model mikroskopowy dla oddziaływań na oczku wielokanałowego molekularnego hamiltonianu Hubbarda [148–150], które mogą dostarczyć parametrów dla efektywnych wielociałowych hamiltonianów molekularnych. Pokazaliśmy, że anizotropowe oddziaływania międzycząsteczkowe powodują, że stany mające większy całkowity rotacyjny moment pędu zostają przesunięte do niższych energii, tak że absolutny stan podstawowy układu molekularnego może mieć całkowity moment pędu większy od zera i być zdegenerowany (patrz Rys. 4). Takie układy mogą być potencjalnie przydatne do realizacji symulatorów kwantowych egzotycznych modeli spinowych. Silne anizotropowe oddziaływania międzycząsteczkowe mogą również wywołać powstanie molekularnego odpowiednika atomowego stanu super-Tonksa-Girardeau'a, ale jednocześnie znaczenie anizotropowych oddziaływań międzycząsteczkowych jest zmniejszone w granicy bardzo silnego oddziaływania izotropowego. Pola magnetyczne i elektryczne indukują dużą gęstość stanów i dużą liczbę antyprzecięć, które można wykorzystać do kontrolowania właściwości układu. Nie znaleziono jednak kwantowego zachowania chaotycznego w otrzymanych widmach energii.

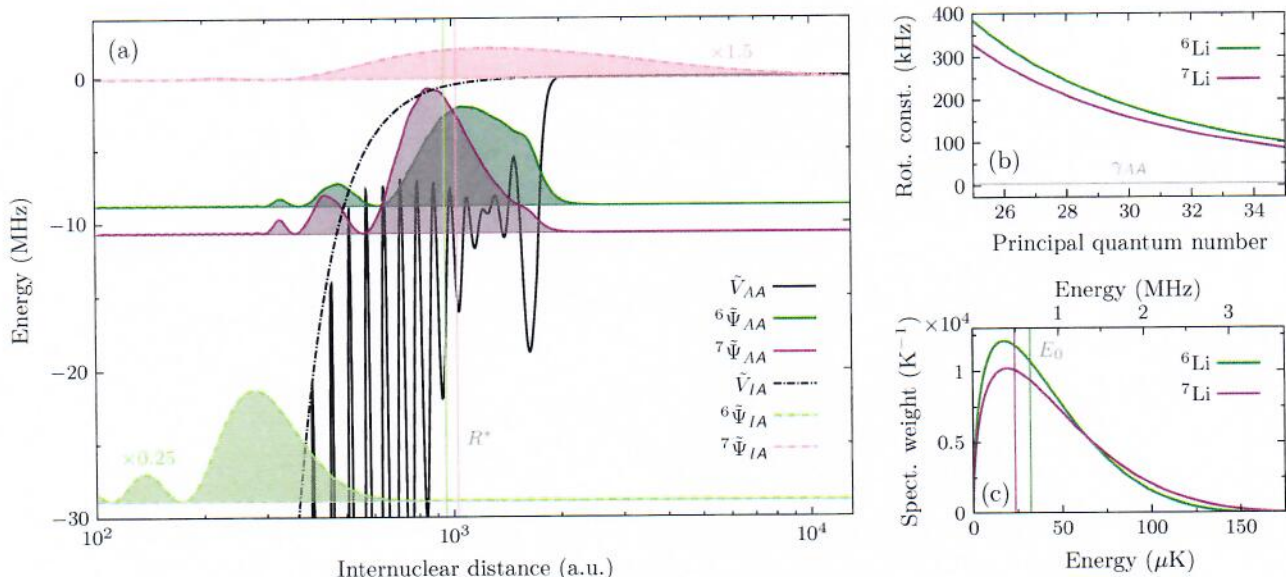


Rysunek 3: Schematyczne przedstawienie badanego układu i jego cech: (a) Ilustracja dwóch dwuatomowych cząsteczek polarnych w pułapce 1D w zewnętrznych polach elektrycznym  $\mathcal{E}$  i magnetycznym  $\mathcal{B}$ . (b) Widmo energii rotacyjnej cząsteczki w pułapce harmonicznej 1D. (c) Energia cząsteczki polarnej w polu elektrycznym (efekt Starka). Z artykułu [H3].



Rysunek 4: Całkowity rotacyjny moment pędu  $J$  stanu podstawowego dla dwóch oddziałujących ze sobą cząsteczek o stałej rotacyjnej  $B = 0.3 \hbar\omega$  w jednowymiarowej pułapce harmonicznej jako funkcja izotropowej  $g_0$  i anizotropowej  $g_{\pm 1}$  siły oddziaływania. Z artykułu [H3].





Rysunek 5: Wykorzystanie cząsteczek Rydberga do zainicjowania ultrazimnego zderzenia jon-atom na przykładzie litu. Funkcja falowa cząsteczki Rydberga,  $R^2 |\Psi_{AA}(R)|^2$ , jest przedstawiona w panelu (a) dla obu izotopów. Jest związana w homojadrowym Li(30s)-Li(2s) potencjale  $\tilde{V}_{AA}(R)$  w sferycznie symetrycznym rotacyjnym stanie podstawowym ( $\tilde{\nu} = \tilde{J} = 0$ ), który jest dostępny eksperymentalnie, co potwierdza panel (b), gdzie pokazano, że stała rotacyjna dla tego stanu jest większa niż szerokość molekularnej linii Rydberga  $\gamma_{AA}$ . Uwolniona przez fotojonizację początkowa funkcja falowa cząsteczki Rydberga ewoluuje w sferycznie symetrycznym potencjale oddziaływania jon-atom  $\tilde{V}_{IA}(R)$  z  $R^*$  oznaczającym jego charakterystyczny zakres. Z powodu zachowania momentu pędu zachodzi tylko rozpraszanie w fali S ( $\tilde{J} = 0$ ) pomimo składowych powyżej  $E_0$  w widmie energii cząsteczki Rydberga, jak pokazano w panelu (c). Nakładanie się pomiędzy  $\tilde{\Psi}_{AA}$  a ostatnim związanym stanem jonu molekularnego  $\tilde{\Psi}_{IA}$  określa frakcję związaną w pakiecie rozproszonej fali. Z artykułu [H4].

### Cząsteczki Rydberga do realizacji zderzeń jon-atom w reżimie ultrazimnym

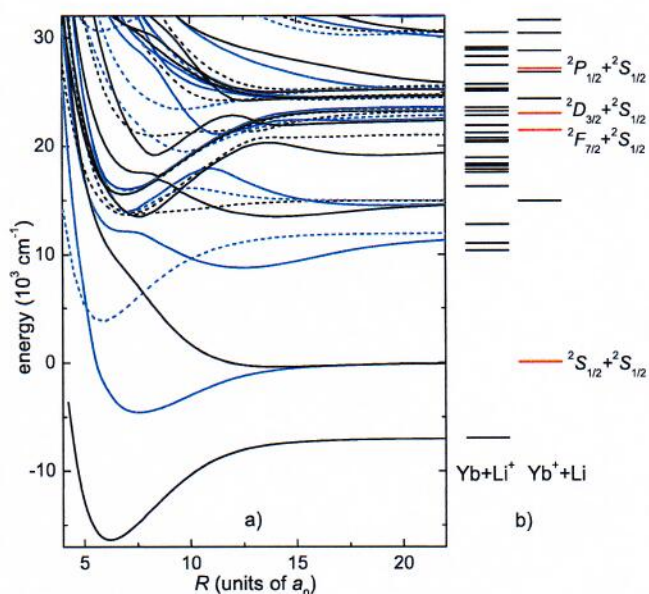
W ciągu ostatnich kilku lat oddziaływania jon-atom były badane w temperaturach rzędu milikelwinów dla różnych kombinacji jonów i atomów przez zastosowanie pułapek hybrydowych, z jonom utrzymywanym w pułapce Paula [O1]. Jednak ultrazimny kwantowy reżim zderzeń nie został jeszcze osiągnięty. Wykazano, że przy użyciu pułapki Paula powstaje ograniczenie minimalnej energii zderzenia, którą można osiągnąć, wywołane przez mikroruch. Tylko dla kombinacji ciężkiego jonu z lekkim atomem, np. dla układów Ca<sup>+</sup> - Li albo Yb<sup>+</sup> - Li, można oczekiwać osiągnięcia reżimu zderzeń w fali s. W przypadku obu tych kombinacji jonów i atomów ostatnio przeprowadzono pomiary zderzeń w zakresie energii milikelwina [151][H6], które jednak nadal były w reżimie klasycznym.

W artykule [H4], we współpracy z grupą eksperymentalną prof. dr. Tillmana Pfau'a z Uniwersytetu w Stuttgarcie, zaproponowaliśmy nową eksperymentalną metodę badania oddziaływań i zderzeń jon-atom, która pozwala rozszerzyć zakres dostępnych temperatur z dotychczas badanego zimnego reżimu na niezbadany ultrazimny reżim. Kluczowym aspektem tej metody jest użycie cząsteczek Rydberga do zainicjowania ultrazimnych zderzeń pomiędzy jonami i atomami. Generowanie i charakterystyka wielu różnych typów cząsteczek Rydberga była aktywnym obszarem badań w ciągu ostatnich kilku lat. Cząsteczki te składają się z atomu Rydberga i co najmniej jednego atomu w stanie podstawowym, który jest związany z rdzeniem jonowym Rydberga na bardzo dużej odległości międzyjądrowej poprzez jego oddziaływanie z elektronem Rydberga [58]. Zaobserwowano dimery, trimery, tetramery i pentamery w trypletowym stanie S [59, 152, 153], oraz zmierzono ich czasy życia [154, 155]. Ponadto badano dimery w trypletowym stanie D [156, 157], a także dime-



ry w mieszanym stanie singletowo-trypletowym [158, 159]. Wreszcie otrzymano egzotyczne stany cząsteczkowe zwane stanami trylobitowym [160–163] i motylowym [164].

Punktem wyjścia proponowanej procedury jest fotoasocjacja pojedynczej cząsteczki Rydberga w ultrazimnej, rzadkiej chmurze atomowej. Cząsteczka Rydberga jest następnie fotonizowana, aby rozpocząć ultrazimne zdarzenie jon-atom między rdzeniem jonowym Rydberga a atomem w stanie podstawowym; tj. początkowa funkcja falowa cząsteczki Rydberga, uwolniona przez fotojonizację, ewoluuje w obecności potencjału oddziaływania jon-atom. Zależnie od długości rozpraszania, albo cały pakiet rozproszonej paczki falowej jest swobodny i rozprasa się dyspersyjnie albo dzieli się na część swobodną i część związaną, wskazującą na tworzenie się jonu molekularnego. Wykrycie wolnego jonu i/lub jonu molekularnego za pomocą detektora pojedynczego jonu wrażliwego na czas i pozycję kończy pojedynczy eksperyment zderzeniowy. Wielokrotne powtarzanie tego pojedynczego zdarzenia pozwala na określenie długości rozpraszania dla zderzeń jon-atom. Zaproponowaną metodę zilustrowaliśmy obliczeniami dla litowego układu jon-atom, dla którego przedstawiliśmy symulacje ewolucji początkowej paczki falowej cząsteczki Rydberga, uwolnionej przez fotojonizację, w obecności potencjału oddziaływania jon-atom. Przewidzieliśmy długości rozpraszania jon-atom dla obliczonego *ab initio* potencjału oddziaływania. Pokazaliśmy, że w przewidywanych granicach długość rozpraszania może być eksperymentalnie określona na podstawie prędkości rozproszonego pakietu falowego w przypadku  ${}^6\text{Li}^+ - {}^6\text{Li}$  oraz z prawdopodobieństwa otrzymywania jonów molekularnych w przypadku  ${}^7\text{Li}^+ - {}^7\text{Li}$ . Proponowany sposób wykorzystania cząsteczek Rydberga do ultrazimnego rozpraszania jon-atom, pokazany na przykładzie litowego układu jon-atom, jest również łatwo stosowany w innych układach, na przykład, w homolub heterojądrowych układach atomów metali alkalicznych lub ziem alkalicznych, w których można tworzyć cząsteczki Rydberga.



Rysunek 6: Struktura stanów cząsteczkowych i atomowych w układzie  $(\text{Yb}+\text{Li})^+$ : a) Nierelatywistyczne krzywe energii potencjalnej dla jonu molekularnego  $\text{LiYb}^+$ . Czarne i niebieskie linie odpowiadają stanom singletowym ( $S = 0$ ) i trypletowi ( $S = 1$ ), natomiast linie ciągłe i przerywane przedstawiają stany z rzutem elektronowego orbitalnego momentu pędu na oś molekularną równym zero ( $\Lambda = 0, \Sigma$  symetria) i odpowiednio niezerowym ( $|\Lambda| > 0$ ). Najniższe 5 stanów elektronowych pochodzi z Ref. [O5]. b) Możliwe progi dysocjacji jon-atom z badanymi w tej pracy kombinacjami zaznaczonymi na czerwono. Energie eksperymentalne pochodzą z bazy danych NIST [165]. Z artykułu [H6].

### Mieszanie chłodzonych laserowo jonów $\text{Yb}^+$ z ultrazimnymi fermionowymi atomami Li

Główną przeszkodą w osiągnięciu reżimu kwantowego w oddziaływaniach jon-atom jest zależne od czasu pole używane w pułapce Paula, które ogranicza osiągalne temperatury w hybrydowych układach jon-atom [O1]. W szczególności mikroruch jonów uwięzionych w pułapce używającej częstotliwości radiowej może spowodować grzanie, gdy dojdzie do zderzenia na małych odległościach międzyatomowych. Wykazano teoretycznie, że najniższe temperatury mogą być osiągnięte w układach o największych stosunkach mas jon/atom  $m_i/m_a$  [62]. Kombinacja jon-atom o najwyższym stosunku masy,  $m_i/m_a \approx 24\text{--}29$ , która pozwala na bezpośrednie chłodzenie laserem to  $\text{Yb}^+ - \text{Li}$ . Reżim

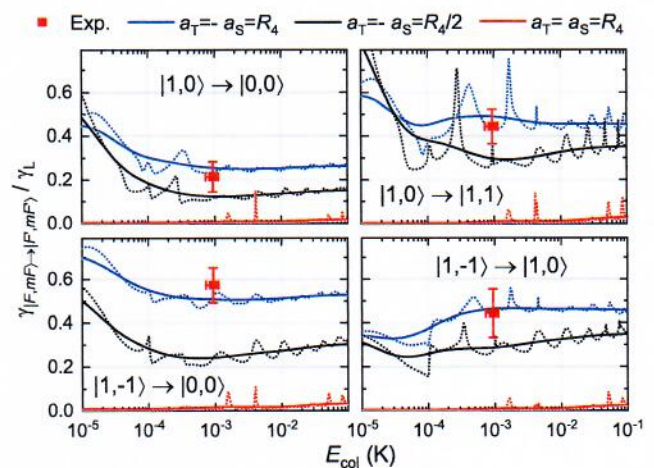


fali  $s$  dla tego układu wynosi  $k_B \cdot 10 \mu\text{K}$ , co jest w zasięgu aktualnych pułapek Paula i najnowocześniejszych metod kompensacji mikroruchu.

W artykule [H6], we współpracy z grupą prof. dr. Rene Gerritsmy z Uniwersytetu w Amsterdamie, zbadaliśmy zimne zderzenia między jonami  $\text{Yb}^+$  i atomami  $^6\text{Li}$ . Szybkości reakcji chemicznych pomiędzy atomami  $^6\text{Li}$  a jonami  $^{171}\text{Yb}^+$ ,  $^{174}\text{Yb}^+$  oraz  $^{176}\text{Yb}^+$  w reżimie mK zostały zmierzone doświadczalnie. Pokazaliśmy, że szybkość reakcji dla atomów i jonów w elektronowym stanie podstawowym jest co najmniej  $10^3$  razy mniejsza niż szybkość zderzeń Langevina. Powinno to być wystarczająco mało dla realizacji współchłodzenia i zastosowań kwantowych. Wyniki te były zgodne z wcześniejszymi obliczeniami [O4][166]. Ponadto jony przygotowano we wzbudzonych stanach elektronowych i wykazano, że głównym procesem reaktywnym występującym w tej sytuacji jest transfer ładunku. Pokazaliśmy, że dla stanów  $^2P_{1/2}$  oraz  $^2F_{7/2}$  w  $^{174}\text{Yb}^+$  oraz  $^{176}\text{Yb}^+$ , szybkość transferu ładunku zbliża się do szybkości kolizji Langevina, podczas gdy dla metastabilnego stanu  $^2D_{3/2}$  znaleźliśmy współczynniki, które są o ponad rząd wielkości mniejsze. Pokazaliśmy, że szybkość reakcji przeniesienia ładunku jest prawie niezależna od energii zderzenia, co sugeruje, że transfer ładunku jest związany z kolizjami Langevina. Otrzymane wyniki nie zależą silnie od izotopu jonu. Niska szybkość transferu ładunku w przypadku kolizji w stanie podstawowym została potwierdzona przez teorię, ale powłoka  $4f$  w jonach  $\text{Yb}^+$  uniemożliwiła dokładne obliczenia szybkości transferu ładunku dla stanów  $^2P_{1/2}$ ,  $^2D_{3/2}$  oraz  $^2F_{7/2}$ . Używając metod *ab initio* chemii kwantowej obliczyliśmy potencjały oddziaływania jon-atom do energii  $30 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$  (patrz Rys. 6) i użyliśmy ich, aby uzyskać jakościowe wyjaśnienie obserwowanych szybkości reakcji.

W przypadku mieszanin jonów i atomów, które mają być użyteczne w zastosowaniach do technologii kwantowych – w których informacja kwantowa będzie przechowywana w stanach wewnętrznych jonów i atomów – wymagane jest, aby szybkości zderzeń zmieniających spin były małe [167]. W niedawnym eksperymencie pokazano bardzo szybką dynamikę zmiany spinu dla jonów  $\text{Yb}^+$  oddziałujących z atomami  $\text{Rb}$  [168]. Oprócz szybkiej wymiany spinów – która zachowuje całkowity spin partnerów kolizji – zaobserwowano również duże szybkości zderzeń nie zachowujących spinu, znane jako relaksacja spinów. Obliczenia teoretyczne sugerują, że wyjątkowo duże sprzężenie spin-orbita drugiego rzędu w  $\text{Yb}^+/\text{Rb}$  jest odpowiedzialne za obserwowane duże szybkości relaksacji spinowej [169]. Dla  $\text{Yb}^+/\text{Li}$  można oczekiwać, że sprzężenie spin-orbita drugiego rzędu będzie znacznie mniejsze.

W artykule [H5], kontynuując współpracę z grupą prof. dr. Rene Gerritsmy z Uniwersytetu w Amsterdamie, zbadaliśmy dynamikę spinów pojedynczych pułapkowanych jonów  $\text{Yb}^+$  zanurzonych w zimnej, spolaryzowanej kąpieli atomów  $^6\text{Li}$ . Specyficzne stany (pseudo-)spinowe w jonie przygotowano przez pompowanie optyczne i impulsy mikrofalowe. Ekranowanie i detekcja fluorescencji pozwoliły zmierzyć stan spinowy jonu po oddziaływaniu z chmurą atomów. Dla  $^{174}\text{Yb}^+$  odkryliśmy, że chmura atomów polaryzuje spin jonu w 93(4)%. Nasze wyniki pokazały bardzo duże szybkości wymiany spinu,  $1.03(12) \cdot \gamma_L$ , natomiast



Rysunek 7: Szybkość wymiany spinowej dla jonu  $^{171}\text{Yb}^+$  zderzającego się z  $^6\text{Li}$  w funkcji energii zderzenia uzyskane w kwantowych obliczeniach rozproszeniowych dla trzech zestawów długości rozpraszania w porównaniu ze zmierzonymi eksperymentalnie szybkościami (czerwone kwadraty). Linie przerywane są szybkościami w funkcji energii zderzenia, a linie ciągłe są szybkościami uśrednionymi termicznie. Z artykułu [H5].



współczynniki relaksacji spinów oszacowano na  $\leq 0.08(4) \cdot \gamma_L$ . Tutaj,  $\gamma_L = 2\pi\rho_{Li}\sqrt{C_4/\mu} = 22(7) \text{ s}^{-1}$  to szybkość zderzeń Langevina, z  $\rho_{Li}$  gęstością atomów Li w lokalizacji jonu,  $C_4$  jest proporcjonalna do polaryzowalności atomu, a  $\mu$  jest masą zredukowaną. Dla izotopu  $^{171}\text{Yb}^+$  przygotowano wszystkie cztery nadsubtelne stany w podstawowym stanie elektronowym i zmierzono wszystkie szybkości wymiany spinu. Tak jak w  $^{174}\text{Yb}^+$ , znaleźliśmy duże szybkości w kierunku polaryzacji spinowej. Jednakże relaksacja ze stanu  $m_F = 1$  w kierunku stanu podstawowego  $F = 0$  występowała z szybkością w tempie  $0.13(3) \cdot \gamma_L$ . Porównaliśmy kwantowe obliczenia rozproszeniowe z mierzoną dynamiką spinów (patrz Rys. 7). Co ciekawe, w naszych obliczeniach stwierdziliśmy, że nawet w reżimie temperatur mK szybkość wymiany spinowej nadal silnie zależy od różnicy między przyjętymi singletową ( $a_S$ ) i trypletową ( $a_T$ ) długościami rozpraszania. Nasze wyniki wskazują na dużą różnicę między singletową i trypletową długością rozpraszania w układzie  $\text{Yb}^+ / ^6\text{Li}$ , co byłoby korzystne dla obserwacji rezonansów Feshbacha. Nasze obliczenia struktury elektronowej potwierdziły również, że szybkości relaksacji spinowej wynikającej ze sprzężenia spin-orbita drugiego rzędu powinny być mniejsze dla  $\text{Yb}^+ / \text{Li}$  niż dla  $\text{Yb}^+ / \text{Rb}$ .

Obecnie kontynuuję współpracę z grupą badawczą prof. dr. Rene Gerritsmy. W ramach tej współpracy ostatnio uzyskaliśmy przełomowe wyniki w zakresie współchłodzenia do reżimu kwantowego zderzeń jon-atom w układzie  $\text{Yb}^+ - \text{Li}$ , które zostaną wkrótce opublikowane.

### Ultrazimne oddziaływania i reakcje chemiczne liniowych anionów wieloatomowych z atomami

Po wielu spektakularnych sukcesach w dziedzinie ultrazimnych atomów społeczność naukowa zwróciła uwagę na badania nad ultrazimnymi cząsteczkami. Niedawno wyprodukowano i zbadano ultrazimne gazy cząsteczek dwuatomowych. Kolejnym celem jest przygotowanie cząsteczek wieloatomowych w bardzo niskich temperaturach. Pierwsze eksperymenty w tym kierunku już rozpoczęto. Jony molekularne są łatwiejsze do przygotowania, pułapkowania i wykrycia w porównaniu z cząsteczkami obojętnymi. Są również ważne w wielu dziedzinach chemii, od chemii organicznej i nieorganicznej po astrochemię. Wieloatomowe jony molekularne są z tego względu obiecującymi układami, aby rozpocząć badania zimnej dynamiki wieloatomowej i reakcji chemicznych na poziomie kwantowym. Ostatnio rozpoczęto pierwsze eksperymenty łączące proste dwuatomowe jony molekularne z ultrazimnymi atomami. Badano dynamikę kationów molekularnych  $\text{N}_2^+$  zanurzonych w ultrazimnych atomach Rb [170] i kationów  $\text{BaCl}^+$  zanurzonych w ultrazimnych atomach Ca [73, 75]. Zderzenia anionów molekularnych  $\text{OH}^-$  z ultrazimnymi atomami Rb badano zarówno eksperymentalnie [171, 172], jak i teoretycznie [172–176]. Chłodzenie prostych jonów molekularnych, takich jak  $\text{MgH}^+$ ,  $\text{NH}_2^-$  i  $\text{OH}^-$  zanurzonych w zimnych gazach buforowych helu lub wodoru molekularnego było również eksperymentalnie [74, 177–181] i teoretycznie [182–184] zbadane.

W artykule [H7] zaproponowałem eksperymenty zderzeniowe liniowych jonów wieloatomowych zanurzonych w ultrazimnych gazach atomowych i zbadalem oddziaływania międzycząsteczkowe i reakcje chemiczne kilku anionów molekularnych ( $\text{OH}^-$ ,  $\text{CN}^-$ ,  $\text{NCO}^-$ ,  $\text{C}_2\text{H}^-$ ,  $\text{C}_4\text{H}^-$ ) z atomami metali alkalicznych (Li, Na, K, Rb, Cs) i ziem alkalicznych (Mg, Ca, Sr, Ba). Wybrane dwuatomowe aniony molekularne są ważne w wielu dziedzinach chemii, podczas gdy rozpatrywane wieloatomowe aniony molekularne są bardzo interesujące dla astrochemii [185]. Zastosowałem nowoczesne techniki *ab initio* w celu obliczenia powierzchni energii potencjalnej (PES) dla tych układów. Zastosowano metodę sprzężonych klasterów ograniczoną do pojedynczych, podwójnych i nieiteracyjnych potrójnych wzbudzeń, CCSD(T), a skalarnie efekty relatywistyczne w cięższych atomach metali modelowano z użyciem małego pseudopotencjału. Wiodące dalekozasięgowe współczynniki oddziaływania izotropowego i anizotropowego uzyskano wykorzystując rachunek zaburzeń. Szczegółowo scharakteryzowano PESy i omówiono ich uniwersalne podobieństwa typowe dla układów zdominowanych przez oddziaływanie indukcyjne. Dwuwymiarowe PESy zostały policzone dla wybranych

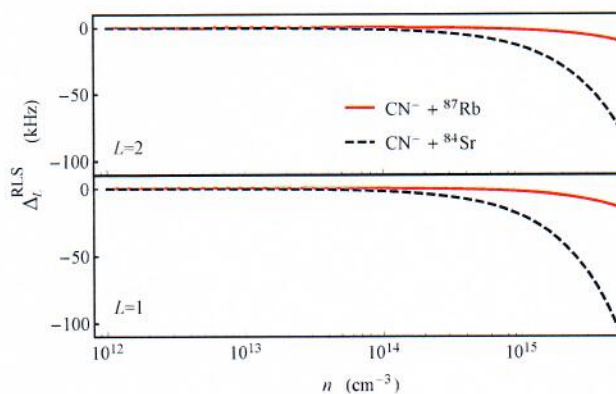


układów i mogą być wykorzystane w obliczeniach zderzeniowych. Możliwe kanały reakcji chemicznych i ich kontrolę przeanalizowano w oparciu o energetykę reagentów. Pokazałem, że większość rozważanych układów anionowych jest stabilna wobec reakcji chemicznych i procesów przeniesienia ładunku, jednak mogą one być indukowane przez wzbudzenie atomów lub anionów z polem lasera. Przedstawiona praca utorowała drogę do badań zderzeniowych i współchłodzenia liniowych jonów wieloatomowych zanurzonych w ultrazimnych gazach atomowych i ich zastosowań w kontrolowalnej chemii, pomiarach precyzyjnych i symulacjach kwantowych.

## Rotacja zimnych jonów cząsteczkowych w kondensacie Bosego-Einsteina

Zimne jony cząsteczkowe są wszechstronną platformą do badania procesów kwantowych jedno-, kilku- i wielociałowych [78, 186, 187]. W przeciwieństwie do neutralnych cząsteczek [187], stopień swobody wykorzystywany do manipulowania jonami molekularnymi - ich ładunek - jest skutecznie oddzielony od ich wewnętrznej struktury, a zatem nawet złożone jony mogą być uwięzione i schłodzone do milikelwinowych temperatur translacyjnych [186]. Jony molekularne można wytwarzać w wybranym stanie rotacyjnym przez pompowanie optyczne [188] lub współchłodzenie jonów w wyselekcjonowanym stanie [189]. Można je pułapkować przez kilka godzin, przy czym czas życia stanu rotacyjnego przekracza 15 minut [189]. Ostatnio ruch rotacyjny cząsteczek zanurzonych w kondensacie Bosego-Einsteina został opisany przez kwazicząstki nowego rodzaju - angulony [190, 191]. W tym modelu obracające się cząsteczki są ubrane w pole wzbudzeń wielociałowych. W ten sposób angulony są rotacyjnym analogiem polaronów [192, 193], aktywnie badanych eksperymentalnie w ultrazimnych gazach kwantowych [105, 194–203]. Jednak algebra nieabelowa i dyskretne widmo energii związane z rotacjami powodują, że fizyka angulonów różni się znacząco w porównaniu z jakimkolwiek problemem polaronowym, w którym bada się ruch translacyjny domieszki.

W artykule [H8], we współpracy z grupą prof. dr. Michaila Lemeshki z Instytutu Nauki i Technologii w Wiedniu, wykorzystaliśmy niedawno opracowaną teorię angulonów [190, 191] do zbadania widma rotacyjnego jonu molekularnego zanurzonego w kondensacie Bosego-Einsteina. Jako przykładowy układ eksperymentalny rozważaliśmy anion cyjanku ( $\text{CN}^-$ ) zanurzony w atomowym BEC  $^{87}\text{Rb}$  oraz  $^{84}\text{Sr}$ . Zilustrowaliśmy naszą technikę anionami molekularnymi, które zostały wcześniej badane w kontekście hybrydowych układów jon-atom [171]. Co więcej, aniony zostały wykorzystane do badania zimnych nieelastycznych [172, 176, 179] i reaktywnych [177] zderzeń i są bardzo istotne dla astrochemii [204]. Warto jednak zauważyć, że przewidywane efekty nie powinny ulec istotnej zmianie, jakościowo lub ilościowo, w przypadku kationów molekularnych. Opierając się na powierzchniach energii potencjalnej, przedstawiliśmy szczegółowe badania rotacyjnego przesunięcia Lamba i struktury nadsubtelnej, indukowanej oddziaływaniami wielociałowymi, które powstają w wyniku ubrania rotacji molekularnej przez pole wzbudzeń fononowych. Wykazaliśmy, że wielkość tych efektów jest wystarczająco duża, aby można je było zaobserwować w nowoczesnych eksperymentach na zimnych jonach molekularnych. W szczególności przesunięcia rotacyjne Lamba oceniono na kilka kHz (patrz Rys. 8). Ponadto wprowadziliśmy nową metodę konstruowania pseudo-



Rysunek 8: Różnicowe rotacyjne przesunięcie Lamba dla  $\text{CN}^- + ^{87}\text{Rb}$  (czerwona krzywa ciągła) i  $\text{CN}^- + ^{84}\text{Sr}$  (czarna krzywa przerywana), jako funkcja gęstości BEC,  $n$ , w skali logarytmicznej. Z artykułu [H8].



Tabela 1: Hybrydowe heterojądrowe układy jon-atom wolne od radiacyjnych strat wynikających z przeniesienia ładunku wśród dostępnych eksperymentalnie kombinacji chłodzonych laserowo jonów i atomów.

Natura jonu/atomu	Układy wolne od strat radiacyjnego przeniesienia ładunku
open-shell/open-shell	Ba <sup>+</sup> /Li, Ca <sup>+</sup> /Cr, Sr <sup>+</sup> /Cr, Ba <sup>+</sup> /Cr, Yb <sup>+</sup> /Cr, Sr <sup>+</sup> /Dy, Ba <sup>+</sup> /Dy, Sr <sup>+</sup> /Er, Ba <sup>+</sup> /Er
open-shell/closed-shell	Ca <sup>+</sup> /Mg, Sr <sup>+</sup> /Mg, Ba <sup>+</sup> /Mg, Yb <sup>+</sup> /Mg, Sr <sup>+</sup> /Ca, Ba <sup>+</sup> /Ca, Ba <sup>+</sup> /Sr, Ca <sup>+</sup> /Yb, Sr <sup>+</sup> /Yb, Ba <sup>+</sup> /Yb
closed-shell/open-shell	Na <sup>+</sup> /Li, K <sup>+</sup> /Li, Rb <sup>+</sup> /Li, Cs <sup>+</sup> /Li, K <sup>+</sup> /Na, Rb <sup>+</sup> /Na, Cs <sup>+</sup> /Na, Rb <sup>+</sup> /K, Cs <sup>+</sup> /K, Cs <sup>+</sup> /Rb jon alkaliczny/Cr, jon alkaliczny/Dy, jon alkaliczny/Er
closed-shell/closed-shell	jon alkaliczny/atom ziem alkalicznych (z wyjątkiem Li <sup>+</sup> /Ba)

potencjału w oparciu o powierzchnie energii potencjalnej, która pozwala efektywnie uzyskać stałe sprężenia dla ultrazimnych modeli polaronowych.

### Ultrazimne magnetycznie przestrajalne oddziaływania bez strat radiacyjnego transferu ładunku między jonami Ca<sup>+</sup>, Sr<sup>+</sup>, Ba<sup>+</sup>, and Yb<sup>+</sup> i atomami Cr

W hybrydowych mieszaninach schłodzonych laserowo pułapkowanych jonów i ultrazimnych atomów, połączonych w jednym układzie doświadczalnym, straty spowodowane radiacyjnymi procesami nieelastycznymi, tj. radiacyjnym przeniesieniem ładunku i radiacyjną asocjacją [68, 167], są podstawą kontrolowalnych reakcji chemicznych w układach jon-atom [79], ale mogą utrudniać współchłodzenie jonów [67] oraz interesujące zastosowania w obliczeniach kwantowych [72] i symulacjach kwantowych fizyki wielu ciał [71]. Straty radiacyjne można zmniejszyć, wybierając układ o korzystnej strukturze elektronowej, taki jak Yb<sup>+</sup>+Li [O4] lub uniknąć, wtedy i tylko wtedy, gdy oddziałujący układ jon-atom znajduje się w swoim elektronowym stanie podstawowym, a przeniesienie ładunku nie jest możliwe. Ten warunek jest spełniony, gdy potencjał jonizacji atomu jest większy niż powinowactwo elektronowe jonu dodatniego. Dotychczas wszystkie doświadczalnie badane hybrydowe heterojądrowe układy jon-atom wykazywały straty radiacyjne [66–69, 168, 205–212]

Straty te są nieuniknione dla prawie wszystkich jonów metali ziem alkalicznych i iterbu zanurzonych w zimnym gazie atomów metali alkalicznych [89, 166, 213–216] (z wyjątkiem jonów Ba<sup>+</sup> w gazie atomów Li). Można ich jednak uniknąć w przypadku niektórych kombinacji jonów metali alkalicznych oddziałujących z atomami metali alkalicznych [217] lub jonów metali ziem alkalicznych, oddziałujących z atomami metali ziem alkalicznych [210] oraz prawie wszystkich kombinacji jonów metali alkalicznych oddziałujących z atomami metali ziem alkalicznych (z wyjątkiem jonu Li<sup>+</sup> w gazie atomów Ba) [por. Tabela1]. Homoładrowe układy jon-atom nie doświadczają strat radiacyjnych, ale wykazują nie zachowujące spinu rezonansowe zderzenia wymiany ładunku [218–220]. Niestety, przygotowanie i manipulowanie chłodzonymi laserowo jonami metali alkalicznych o zamkniętej powłoce i atomami metali ziem alkalicznych o zamkniętej powłoce jest eksperymentalnie trudniejsze niż stosowanie atomów otwartopowłokowych. Ponadto, przestrajalne magnetycznie rezonanse Feshbacha przewidywane dla mieszanin atomów zamknięto i otwartopowłokowych są bardzo wąskie [221, 222]. Dlatego użyteczna kontrola ultrazimnych oddziaływań jonowo-atomowych z magnetycznie przestrajalnymi rezonansami Feshbacha powinna być oczekiwana tylko wtedy, gdy zarówno jony, jak i atomy mają naturę otwartopowłokową [100].

W artykule [H9] zaproponowałem jony Ca<sup>+</sup>, Sr<sup>+</sup>, Ba<sup>+</sup>, and Yb<sup>+</sup> zanurzone w ultrazimnym gazie atomów Cr jako eksperymentalnie interesujący układ heterojądrowy, w którym oddziaływania jon-atom w ultraniskich temperaturach można kontrolować za pomocą magnetycznie przestrajalnych rezonansów Feshbacha bez radiacyjnych strat związanych z przenoszeniem ładunku. Wśród obecnie eksperymentalnie dostępnych chłodzonych laserowo pułapkowanych jonów i ultrazimnych

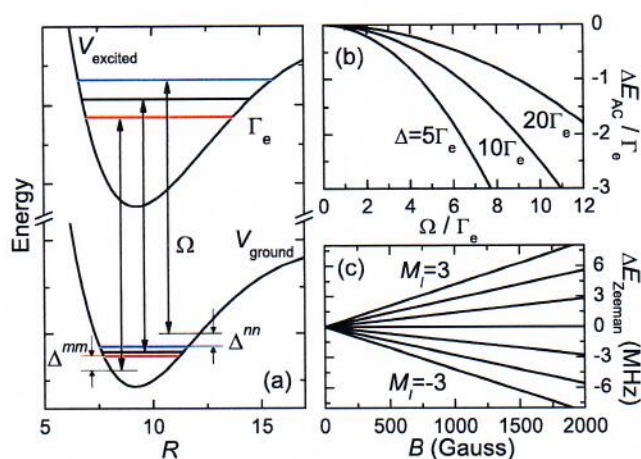


atomów, inne możliwe kombinacje to jony  $Ba^+$  i atomy Li, a także jony  $Sr^+$  lub  $Ba^+$  i atomy Dy lub Er. Zastosowałem techniki *ab initio* w celu zbadania właściwości podstawowego stanu elektronowego jonów molekularnych  $CaCr^+$ ,  $SrCr^+$ ,  $BaCr^+$  oraz  $YbCr^+$ . Oddziaływanie jonu metalu ziem alkalicznych w stanie  $^2S$  stanu z atomem chromu w stanie  $^7S$  prowadzi do powstania dwóch molekularnych stanów elektronowych  $X^6\Sigma^+$  oraz  $a^8\Sigma^+$  [223]. Policzyłem krzywe energii potencjalnej, stałe elektryczne momenty dipolowe i statyczne elektryczne dipolowe polaryzowalności dla tych stanów. Zastosowałem metodę sprzężonych klasterów, ograniczoną do pojedynczych, podwójnych i nieiteracyjnych potrójnych wzbudzeń, RCCSD(T) i wieloreferencyjną metodę oddziaływania konfiguracji ograniczoną do pojedynczych i podwójnych wzbudzeń, MRCISD. Relatywistyczne efekty skalarnie zostały uwzględnione z użyciem pseudopotencjałów o małym rdzeniu. Otrzymałem również wiódące dalekozasięgowe współczynniki oddziaływania indukcyjnego i dyspersyjnego. Przeanalizowałem również magnetyczne rezonanse Feshbacha między jonami  $Ca^+$ ,  $Sr^+$ ,  $Ba^+$  i  $Yb^+$  oddziałującymi z atomami Cr. Przedstawiona badania utworowały drogę do bardziej złożonych badań nad tworzeniem i stosowaniem hybrydowych układów jon-atom wolnych od strat związanych z radiacyjnym transferem ładunku.

### Ultradźwięczne reakcje wymiany izotopów między dimerami heterojądrowymi w polach zewnętrznych

Ultradźwięczne cząsteczki stały się ostatnio nowym potężnym narzędziem do badania chemii na podstawowym kwantowym poziomie [12]. Produkcja ultradźwięcznego względnie gęstego gazu cząsteczek w ich bezwzględnie rozbudowanym stanie podstawowym [23–25] pozwoliła na przełomowe eksperymenty dotyczące kontrolowanych reakcji chemicznych [29–31]. Osiągnięto bezprecedensową kontrolę nad stanami kwantowymi reagentów zarówno przez dobór ich stanów wewnętrznych, jak i przez strojenie zderzeń dipolarnych z zewnętrznym polem elektrycznym w zredukowanej wymiarowości. Kolejnym oczekiwanym kamieniem milowym w kierunku ultradźwięcznej kontrolowalnej chemii będzie pomiar i kontrola rozkładu stanów produktów [224].

Statystyki kwantowe [29], tunelowanie kwantowe i odbicie od bariery odśrodkowej [225], jak również wpływ pól zewnętrznych [31] mogą modyfikować stałe szybkości zderzeń dla ultradźwięcznych reakcji chemicznych o wiele rzędów wielkości, ponieważ przy bardzo niskich temperaturach reagenty mogą być przygotowane w jednym stanie kwantowym i nawet słabe zaburzenia mogą być porównywalne lub większe od energii zderzenia [224]. Jednocześnie energia uwolniona w reakcjach chemicznych pomiędzy polarnymi cząsteczkami metali alkalicznych w stanie elektronowym  $^1\Sigma^+$ , w podstawowym stanie rozbudowanym, jeśli jest to dozwolone energetycznie, wynosi co najmniej 12 K dla K $Rb$ , lub więcej dla innych cząsteczek [226]. Oznacza to, że spodziewane są produkty w wielu stanach kwantowych, o stosunkowo dużej energii kinetycznej, których nie można złapać w pułapce, a zatem perspektywy obserwowania efektów kwantowych



Rysunek 9: (a) Schemat selektywnej kontroli przy użyciu dynamicznego przesunięcia Starka. Różne poziomy odpowiadają różnym mieszaninom izotopów (energije nie są w skali). (b) Przesunięcie Starka dla różnych odstrojeń lasera vs. częstotliwość Rabi'ego pola laserowego  $\Omega$ . (c) Poziomy Zeemana  $^{87}Rb_2$  vs. pole magnetyczne. Z artykułu [H10].



i kontroli dystrybucji produktów są ograniczone [227]. Z tego powodu stałe szybkości dla ultrazimnych zderzeń reaktywnych cząsteczek KRb okazały się uniwersalne, to znaczy niezależne od dynamiki na małych odległościach [225].

W artykule [H10] zaproponowałem ultrazimne reakcje wymiany izotopów między dimerami heterojądrowymi – prototyp reakcji wymiany atomów – jako obiecujący układ do badania modeli kontrolowalnej reaktywności chemicznej. Pokazałem, że reakcje wymiany izotopów między heterojądrowymi dimerami metali alkalicznych, metali alkalicznych i lantanowców, składającymi się z dwóch izotopów tego samego atomu, są egzotermiczne ze zmianą energii w zakresie 1-8000 MHz. W wyniku tego powstające produkty są zimne lub ultrazimne. Dla tych reakcji chemicznych istnieje tylko jeden ro-wibracyjny i co najwyżej kilka nadsubtelnych możliwych stanów produktów z energią kinetyczną w reżimie zimnym lub ultrazimnym. Liczbę i energię otwartych i zamkniętych kanałów reaktywnych można kontrolować za pomocą lasera i pól magnetycznych. Wykazałem, że te egzotermiczne reakcje chemiczne mogą być dostrojone do bycia endotermicznymi przez zastosowanie światła laserowego bliskorezonansowego z molekularnym przejściem w heterojądrowych reagentach, a nierezonansowego dla produktów homojądrowych (por. Rys. 9). Zastosowanie pola magnetycznego może zapewnić dodatkową kontrolę nad liczbą i energią otwartych i zamkniętych kanałów reaktywnych. Proponowane układy i wymagane wartości pól są dostępne w trwających obecnie eksperymentach. Przedstawione schematy kontroli mają również zastosowanie do innych reakcji wymiany izotopów, np. w ultrazimnych mieszaninach cząsteczek i atomów. Przedstawiona propozycja utorowała drogę do zbadania dynamiki ultrazimnych reakcji chemicznych, wykraczających poza uniwersalną granicę, ze znaczącą kontrolą stanów kwantowych nie tylko reagentów, ale także produktów.

#### 4. Podsumowanie

Reasumując, realizacja projektów stanowiących prezentowane osiągnięcie naukowe znacznie zwiększyła wiedzę o właściwościach, oddziaływaniach, zimnych zderzeniach, reakcjach chemicznych i sterowalności z zewnętrznymi polami ultrazimnych mieszanin kwantowych atomów, jonów i cząsteczek – układów, które są interesujące z fundamentalnego punktu widzenia. Zaproponowaliśmy i zbadaliśmy nowe koncepcje, układy i narzędzia do ich badania. Otworzyliśmy drogę do nowych osiągnięć i badań nad ultrazimną materią kwantową, nowych sposobów inżynierii ultrazimnych sterowalnych układów atomowych, jonowych i molekularnych oraz ich zastosowań w badaniu różnych zjawisk kwantowych. Uzyskane wyniki teoretyczne wyjaśniają, dają wskazówki i inspirują trwające i nadchodzące prace eksperymentalne. Wszystkie podjęte wysiłki przynoszą lepsze zrozumienie kwantowej natury świata na poziomie mikroskopowym, niezbędne dla wszystkich gałęzi fizyki i innych nauk przyrodniczych.

W tej chwili, wraz z moją grupą badawczą i w ścisłej współpracy z partnerami eksperymentalnymi, kontynuuję intensywne badania zimnych oddziaływań i zderzeń w układach atomowych, jonowych i cząsteczkowych wraz z ich zastosowaniami, od precyzyjnych pomiarów do symulacji kwantowych.



## V. OMÓWIENIE POZOSTAŁYCH OSIĄGNIĘĆ NAUKOWO-BADAWCZYCH

### A. DANE BIBLIOMETRYCZNE (24.04.2019)

- liczba opublikowanych i zaakceptowanych artykułów: **24**
- łączna liczba cytowań bez autocytowań: **256** (wg. Web of Science)
- h-indeks (indeks Hirscha): **12** (wg. Web of Science)
- suma współczynników wpływu: **126,1**
- granty badawcze: **4** (2 z NCN, 2 z FNP) - łącznie **4,3 mln PLN**
- opieka naukowa: **4** licencjantów, **3** magistrantów, **4** doktorantów (w trakcie), **2** postdoków
- wykłady na zaproszenie na międzynarodowych konferencjach: **4**
- inne wykłady na międzynarodowych konferencjach: **18**
- seminaria wygłoszone na zaproszenie za granicą: **14**
- seminaria wygłoszone na zaproszenie w Polsce: **11**
- recenzje artykułów dla międzynarodowych czasopism: **32**
- recenzje prac doktorskich za granicą: **2**

Szczegółowe informacje zamieszczono w Załączniku nr 4.

### B. LISTA PUBLIKACJI NIE UWZGLĘDNIONYCH W OSIĄGNIĘCIU WSKAZANYM W PKT. IV

- [O1] **M. Tomza**, K. Jachymski, R. Gerritsma, A. Negretti, T. Calarco, Z. Idziaszek, P. S. Julienne, *Cold hybrid ion-atom systems*, Reviews of Modern Physics zaakceptowany/w druku (2019), artykuł przeglądowy (arXiv:1708.07832).
- [O2] T. Grining, **M. Tomza**, M. Lesiuk, M. Przybytek, M. Musial, R. Moszynski, M. Lewenstein, P. Massignan, *Crossover between few and many fermions in a harmonic trap*, Physical Review A 92, 061601(R) (2015), Rapid Communication.
- [O3] T. Grining, **M. Tomza**, M. Lesiuk, M. Przybytek, M. Musial, P. Massignan, M. Lewenstein, R. Moszynski, *Many interacting fermions in a one-dimensional harmonic trap: a quantum-chemical treatment*, New Journal of Physics 17, 115001 (2015).
- [O4] **M. Tomza**, C. P. Koch, R. Moszynski, *Cold interactions between an  $Yb^+$  ion and a Li atom: Prospects for sympathetic cooling, radiative association, and Feshbach resonances*, Physical Review A 91, 042706 (2015).
- [O5] **M. Tomza**, *Ab initio properties of the ground-state polar and paramagnetic europium-alkali-metal-atom and europium-alkaline-earth-metal-atom molecules*, Physical Review A 90, 022514 (2014).
- [O6] **M. Tomza**, R. Gonzalez-Ferez, C. P. Koch, R. Moszynski, *Controlling magnetic Feshbach resonances in polar open-shell molecules with non-resonant light*, Physical Review Letters 112, 113201 (2014).



- [O7] **M. Tomza**, K. W. Madison, R. Moszynski, R. Krems, *Chemical reactions of ultracold alkali-metal dimers in the lowest-energy  $3\Sigma$  state*, *Physical Review A* 88, 050701(R) (2013), Rapid Communication.
- [O8] **M. Tomza**, *Prospects for ultracold polar and magnetic chromium–closed-shell-atom molecules*, *Physical Review A* 88, 012519 (2013).
- [O9] S. Amaran, R. Kosloff, **M. Tomza**, W. Skomorowski, F. Pawlowski, R. Moszynski, L. Rybak, L. Levin, Z. Amitay, J. M. Berglund, D. M. Reich, C. P. Koch, *Femtosecond two-photon photoassociation of hot magnesium atoms: A quantum dynamical study using thermal random phase wavefunctions*, *Journal of Chemical Physics* 139, 164124 (2013).
- [O10] **M. Tomza**, W. Skomorowski, M. Musial, R. Gonzalez-Ferez, C. P. Koch, R. Moszynski, *Interatomic potentials, electric properties and spectroscopy of the ground and excited states of the  $Rb_2$  molecule: ab initio calculations and effect of a non-resonant field*, *Molecular Physics* 111, 1781 (2013).
- [O11] **M. Tomza**, M. H. Goerz, M. Musial, R. Moszynski, C. P. Koch, *Optimized production of ultracold ground-state molecules: Stabilization employing potentials with ion-pair character and strong spin-orbit coupling*, *Physical Review A* 86, 043424 (2012).
- [O12] L. Rybak, S. Amaran, L. Levin, **M. Tomza**, R. Moszynski, R. Kosloff, C. P. Koch, Z. Amitay, *Generating Molecular Rovibrational Coherence by Two-Photon Femtosecond Photoassociation of Thermally Hot Atoms*, *Physical Review Letters* 107, 273001 (2011).
- [O13] L. Rybak, Z. Amitay, S. Amaran, R. Kosloff, **M. Tomza**, R. Moszynski, C. P. Koch, *Femtosecond coherent control of thermal photoassociation of magnesium atoms*, *Faraday Discussions* 153, 383 (2011).
- [O14] **M. Tomza**, F. Pawlowski, M. Jeziorska, C.P. Koch, R. Moszynski, *Formation of ultracold  $SrYb$  molecules in an optical lattice by photoassociation spectroscopy: theoretical prospects*, *Physical Chemistry Chemical Physics* 13, 18893 (2011).

### C. OMÓWIENIE OSIĄGNIĘĆ NAUKOWO-BADAWCZYCH NIE UWZGLĘDNIONYCH W OSIĄGNIĘCIU WSKAZANYM W PKT. IV

Pracę badawczą w dziedzinie chemii kwantowej i teoretycznej fizyki atomowej, molekularnej i optycznej rozpocząłem w 2008 r., przygotowując pracę magisterską na temat "Dwufotonowej fotoasocjacji zimnych atomów w femtosekundowym polu laserowym", która została obroniona z wyróżnieniem w 2009 r. oraz wyróżniona nagrodą im. Prof. Rychlewskiego, przyznawaną przez Polskie Towarzystwo Chemiczne za najlepszą pracę magisterską z chemii kwantowej w Polsce. W mojej pracy magisterskiej badałem koherentną kontrolę fotoasocjacji dwufotonowej ultrazimnych atomów Ca w polu impulsów lasera femtosekundowego, stosując efektywny dwustanowy hamiltonian w przybliżeniu fali rotującej. Obliczyłem krzywe energii potencjalnej, dwufotonowe dipolowe momenty przejścia oraz polaryzacje dynamiczne przy użyciu teorii odpowiedzi sformułowanej w ramach metody sprzężonych klasterów. Propagator Czebyszewa był używany do rozwiązywania zależnego od czasu równania Schrödingera. Impulsy laserowe były kształtowane zarówno w dziedzinie częstotliwości w reżimie słabego pola, jak i w dziedzinie czasu w reżimie silnego pola. Celem projektu było znalezienie warunków dla wydajnej dwufotonowej fotoasocjacji dwóch ultrazimnych atomów w ultrazimne cząsteczki, gdy wzbudzenie atomowe jest koherentnie tłumione, podczas gdy tworzenie słabo związanych cząsteczek tuż poniżej progu atomowego jest zwiększone. Praca była zrealizowana pod kierunkiem prof. dr. hab. Roberta Moszyńskiego i we współpracy z prof. dr. Christiane Koch.



Następnie użyłem schematu obliczeniowego opracowanego w mojej pracy magisterskiej w obliczeniach w ramach dużego projektu teoretyczno-eksperymentalnego, którego celem było pokazanie femtosekundowej koherentnej kontroli dwufotonowej fotoasocjacji termicznych atomów Mg w cząsteczki Mg<sub>2</sub>. W ramach tej współpracy obliczyłem krzywe energii potencjalnej, dwufotonowe dipolowe momenty przejścia i polaryzacje dynamiczne. Eksperymenty zrealizowała grupa prof. dr. Zohara Amitay'a w Technionie - Izraelskim Instytucie Technologicznym, a wyniki tej współpracy zostały zaprezentowane w publikacjach [O12], [O11], [O8]. Najważniejszym odkryciem było pokazanie formowania się cząsteczek dwuatomowych z koherencją rotacyjną i wibracyjną w dwufotonowej femtosekundowej fotoasocjacji gorących atomów. Koherentne superpozycje związanych poziomów ro-wibracyjnych w stanie wzbudzonym elektronowo były badane przez opóźniony w czasie trzeci foton, a generowanie koherencji wyjaśniono przez filtrowanie Franck-Conzona energii zderzeń i fal parcjalnych. Otrzymane wyniki uutorowały drogę do koherentnej kontroli tworzenia wiązań chemicznych [228].

Moje studia doktorskie rozpocząłem w 2009 roku i dotyczyły one badań teoretycznych dynamiki kwantowej i kontroli ultrazimnych cząsteczek w polach zewnętrznych. Moja praca doktorska pt. "Quantum dynamics and control of ultracold molecules in external fields" została obroniona w 2014 r. pod kierunkiem prof. dr. hab. Roberta Moszyńskiego na Uniwersytecie Warszawskim i prof. dr. Christiane Koch z Uniwersytetu w Kassel w Niemczech. Zaproponowałem i zbadałem nowe schematy formowania i kontroli kwantowej, które torują drogę do pełnej kontroli kwantowej nad procesami molekularnymi. Najnowocześniejsze metody *ab initio* zostały zastosowane do zbadania struktury elektronowej układów molekularnych ważnych dla trwających lub planowanych badań eksperymentalnych i teoretycznych w ultraniskich temperaturach. Następnie wykorzystałem dane dotyczące struktury elektronowej zarówno w zależnych od czasu, jak i niezależnych od czasu badaniach dynamiki molekularnej w projektach dotyczących struktury, powstawania, kontroli i zderzeń ultrazimnych atomów i cząsteczek. Sześć publikacji [O13], [O10], [O9], [O7], [O6] i [O5] stanowiło trzon pracy. Wszystkie programy napisane w ramach badań doktorskich zostały włączone do biblioteki programów do symulacji zależnej od czasu kwantowej dynamiki molekularnej QDYN, opracowanej w grupie prof. dr. Christiane Koch z Uniwersytetu w Kassel w Niemczech.

W artykule [O14] zbadaliśmy strukturę elektronową cząsteczki SrYb i wykorzystaliśmy ją do pokazania możliwości formowania mocno związanych ultrazimnych cząsteczek SrYb w sieci optycznej w eksperymencie fotoasocjacji przy użyciu lasera pracy ciągłej. Było to pierwsze opisane w piśmiennictwie badanie powstawania ultrazimnych polarnych cząsteczek z dwóch atomów o zamkniętej powłoce. Zaproponowaliśmy fotoasocjację w pobliżu przejścia linii interkombinacyjnej atomu strontu do poziomów wibracyjnych silnie zmieszanych przez sprzężenie spin-orbita stanów elektronowych  $b^3\Sigma^+$ ,  $a^3\Pi$ ,  $A^1\Pi$  oraz  $C^1\Pi$ , z późniejszą skuteczną stabilizacją do poziomu wibracyjnego  $v'' = 1$  elektronowego stanu podstawowego. Cząsteczki SrYb w stanie podstawowym mogą być następnie otrzymane poprzez wykorzystanie indukowanych zderzeniami przejść z  $v'' = 1$  do  $v''' = 0$ . Alternatywnie, fotoasocjacja i stabilizacja do  $v'' = 0$  mogą przebiegać poprzez stymulowane adiabaticzne przejście Ramana, pod warunkiem, że częstotliwość pułapkowania sieci optycznej jest wystarczająco duża i spójność fazowa między impulsami może być utrzymana przez co najmniej dziesiątki mikrosekund.

W artykule [O10], we współpracy z prof. dr. hab. Moniką Musiał z Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach, zbadaliśmy strukturę elektronową cząsteczki Rb<sub>2</sub>, wykorzystując metodę podwójnego przyłączenia elektronów w formalizmie przestrzeni Focka w metodzie sprzężonych klasterów. Obliczyliśmy wszystkie stany elektronowe do asymptoty  $5s + 5d$ , czyli energii około  $26,000 \text{ cm}^{-1}$ . Obliczenia były pierwszymi opublikowanymi w piśmiennictwie badaniami, które wykorzystały niedawno opracowaną metodę do generowania wysoce dokładnych potencjałów oddziaływań międzyatomowych. Aby poprawnie przewidzieć właściwości spektroskopowe Rb<sub>2</sub>, obliczyliśmy elektryczne



dipolowe momenty przejść, elementy nieadiabatyicznego sprzężenia i macierze sprzężenia spin-orbita oraz statyczne dipolowe polaryzowalności za pomocą wieloreferencyjnej metody oddziaływania konfiguracji. Zbadaliśmy również wpływ silnego nierezonansowego światła laserowego na strukturę ro-wibracyjną cząsteczek z otwartą powłoką na przykładzie przejść między elektronowym stanem podstawowy  $X^1\Sigma_g^+$  i stanami wzbudzonymi  $A^1\Sigma_u^+$  and  $b^3\Pi_u$ , sprzężonymi przez oddziaływanie spin-orbita w cząsteczce  $\text{Rb}_2$ . W przypadku nierezonansowych natężeń pola rzędu  $10^9 \text{ W/cm}^2$  oddziaływanie spin-orbita i sprzężenie z polem nierezonansowym stają się porównywalne. Pole nierezonansowe może być więc użyte do kontrolowania singletowo-trypletowego charakteru poziomów ro-wibracyjnych.

W artykule [O8] zaproponowałem i zbadłem nową klasę wysoce magnetycznych i polarnych cząsteczek składających się z chromu i zamknięto-powłokowych atomów metali ziem alkalicznych. Cząsteczki te posiadają duże momenty dipolowe zarówno magnetyczne, jak i elektryczne, co czyni je potencjalnie interesującymi kandydatami do ultrazimnych badań fizyki wielu ciał. Zwłaszcza współzawodnictwo między magnetycznymi i elektrycznymi oddziaływaniami dipolowymi oraz kontrola zewnętrznymi polami elektrycznym i magnetycznym może być realizowana i badana za pomocą tych cząsteczek.

W artykule [O7], we współpracy z prof. dr. Romanem Kremsem z Uniwersytetu Kolumbii Brytyjskiej w Vancouver, zbadaliśmy oddziaływania polarnych dimerów metali alkalicznych w kwintowym stanie spinowym i wykazaliśmy tworzenie się głęboko związanych kompleksów przejściowych. Kompleksy przejściowe mogą rozkładać się adiabatyicznie do homojądrowych dimerów metali alkalicznych (dla wszystkich cząsteczek z wyjątkiem  $\text{KRb}$ ) i do trimerów metali alkalicznych (dla wszystkich cząsteczek) bez barier dla takich reakcji chemicznych. Oznacza to, że wszystkie dimery metali alkalicznych w stanie  $a^3\Sigma^+$  są niestabilne chemicznie w ultrazimnych temperaturach i użycie sieci optycznej do segregacji cząsteczek i tłumienia strat może być konieczne. Przeanalizowaliśmy również unikalne cechy reakcji chemicznych ultrazimnych dimerów metali alkalicznych w stanie elektronicznym  $a^3\Sigma^+$ , które można kontrolować za pomocą pól zewnętrznych.

W artykule [O6] zaproponowaliśmy nierezonansowe światło laserowe do kontrolowania magnetycznych rezonansów Feshbacha w ich położeniu i szerokości w polarnych cząsteczkach paramagnetycznych w stanie podstawowym. Naturalne magnetycznie przestrajalne rezonanse Feshbacha w takich cząsteczkach są zbyt wąskie, aby umożliwić magnetoasocjację, zaczynając od ultrazimnych atomów. Dla nierezonansowych natężeń pola rzędu  $10^9 \text{ W/cm}^2$  pokazaliśmy, że szerokość rezonansów można zwiększyć o trzy rzędy wielkości, osiągając kilka Gaussów. To otworzyło drogę do wytwarzania ultrazimnych cząsteczek z dużymi momentami dipolowymi elektrycznymi i magnetycznymi, a tym samym do symulacji kwantowych fizyki wielu ciał z takimi cząstkami.

W artykule [O5] zaproponowałem i zbadłem właściwości elektronowego stanu podstawowego polarnych i paramagnetycznych cząsteczek składających się z atomu europu i atomu w stanie  $S$ . Zastosowałem techniki *ab initio* do obliczenia krzywych energii potencjalnej dla atomów europu oddziałujących z atomami alkalicznymi i ziem alkalicznych w przybliżeniu Born-Oppenheimera dla wysokospinowych elektronowych stanów podstawowych. Odkryłem, że cząsteczki  $\text{EuK}$ ,  $\text{EuRb}$  i  $\text{EuCs}$  posiadają zarówno duży elektryczny jak i magnetyczny moment dipolowy, co czyni je potencjalnie interesującymi kandydatami do ultrazimnych wielociałowych symulacji kwantowych, zwłaszcza w sytuacji, kiedy będą spułapkowane w sieci optycznej w połączonych polach elektrycznym i magnetycznym.

W artykule [O4] po raz pierwszy zbadaliśmy strukturę elektronową jonu molekularnego  $\text{LiYb}^+$ , a wyniki obliczeń *ab initio* zastosowaliśmy w obliczeniach zderzeniowych. Pokazaliśmy pomyślnie perspektywy współchłodzenia jonu  $\text{Yb}^+$  zanurzonego w ultrazimnym gazie atomów  $\text{Li}$ . Obliczyliśmy stałe szybkości zderzeń elastycznych i nieelastycznych wynikających z radiacyjnego transferu ładunku i radiacyjnej asocjacji. Otrzymaliśmy widma jednofotonowej fotoasocjacji dla tworzenia jo-



nów molekularnych w stanie singletowym i dwu-fotonowej fotoasocjacji dla tworzenia jonów molekularnych we wzbudzonym stanie trypletowym oraz zaproponowaliśmy spektroskopię fotoasocjacji pojedynczej cząsteczki. Przeanalizowaliśmy konsekwencje niniejszych wyników dla budowy symulatora kwantowego, emulującego fizykę ciała stałego za pomocą hybrydowego układu ultrazimnych jonów  $\text{Yb}^+$  i atomów Li.

Podczas mojego stażu podoktorskiego w Instytucie Fotoniki w Barcelonie skupiłem część moich zainteresowań badawczych na problemach kwantowych układów wielociałowych. W artykułach [O2] i [O3], które powstały we współpracy z prof. dr. hab. Maciejem Lewensteinem, zastosowaliśmy metody *ab initio* chemii kwantowej do zbadania fermionów o spinie 1/2 oddziałujących poprzez dwuciałowy potencjał kontaktowy w jednowymiarowej pułapce harmoniczej. Zbadaliśmy również przejście od kilku do wielu fermionów w pułapce harmoniczej, gdzie odkryliśmy, że energia zbiega do granicy wielociałowej zaskakująco szybko z ilością atomów dla każdej wartości siły oddziaływania, podczas gdy wiele atomów jest potrzebnych do powstania nieanalitycznego zachowania przerwy energetycznej parowania i wygładzenie oscylacji potencjału chemicznego indukowanych przez strukturę powłokową pułapki. Tę linię badań kontynuuję z częścią mojej grupy badawczej, badając układy kilku i wielu wysoce magnetycznych polarnych cząsteczek i jonów molekularnych.

Po powrocie na Uniwersytet Warszawski pod koniec 2016 roku założyłem własną grupę badawczą, aby móc aktywnie realizować moje pomysły i projekty naukowe. Zaangażowałem w tym celu kilku studentów studiów licencjackich i magisterskich, czterech doktorantów i jednego doktora na stażu podoktorskim. Naszym celem jest prowadzenie badań na froncie fizyki atomowej, molekularnej i optycznej oraz chemii kwantowej, w ścisłej współpracy z moimi międzynarodowymi teoretycznymi i eksperymentalnymi partnerami badawczymi, wybierając układy, problemy i aplikacje, które są ważne dla trwających i przyszłych prac eksperymentalnych.

## Literatura

- [1] D. DeMille, J. M. Doyle, and A. O. Sushkov, *Science* **357**, 990 (2017).
- [2] J. L. Bohn, A. M. Rey, and J. Ye, *Science* **357**, 1002 (2017).
- [3] C. Gross and I. Bloch, *Science* **357**, 995 (2017).
- [4] W. D. Phillips, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 721 (1998).
- [5] J. Weiner, V. S. Bagnato, S. Zilio, and P. S. Julienne, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1 (1999).
- [6] T. W. Hänsch, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 1297 (2006).
- [7] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 885 (2008).
- [8] I. Bloch, J. Dalibard, and S. Nascimbène, *Nature Phys.* **8**, 267 (2012).
- [9] J. I. Cirac and P. Zoller, *Nature Phys.* **8**, 264 (2012).
- [10] L. D. Carr, D. DeMille, R. V. Krems, and J. Ye, *New J. Phys.* **11**, 055049 (2009).
- [11] M. Weidemüller and C. Zimmermann, eds., *Cold Atoms and Molecules* (Wiley, 2009).
- [12] R. Krems, B. Friedrich, and W. C. Stwalley, eds., *Cold Molecules: Theory, Experiment, Applications* (CRC Press, 2009).
- [13] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *Nature* **415**, 39 (2002).
- [14] I. Bloch, *Nature Phys.* **1**, 23 (2005).
- [15] T. Fukuhara, P. Schauss, M. Endres, S. Hild, M. Cheneau, I. Bloch, and C. Gross, *Nature* **502**, 76 (2013).
- [16] T. Fukuhara, A. Kantian, M. Endres, M. Cheneau, P. Schauß, S. Hild, D. Bellem, U. Schollwöck, T. Giamarchi, C. Gross, *et al.*, *Nat. Phys.* **9**, 235 (2013).
- [17] K. Góral, L. Santos, and M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 170406 (2002).
- [18] A. Micheli, G. K. Brennen, and P. Zoller, *Nature Phys.* **2**, 341 (2006).
- [19] F. Herrera, K. W. Madison, R. V. Krems, and M. Berciu, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 223002 (2013).
- [20] D. DeMille, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 067901 (2002).



- [21] D. DeMille, S. Sainis, J. Sage, T. Bergeman, S. Kotochigova, and E. Tiesinga, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 043202 (2008).
- [22] D. DeMille, S. B. Cahn, D. Murphree, D. A. Rahmlow, and M. G. Kozlov, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 023003 (2008).
- [23] K. K. Ni, S. Ospelkaus, M. H. G. de Miranda, A. Pe'er, B. Neyenhuis, J. J. Zirbel, S. Kotochigova, P. S. Julienne, D. S. Jin, and J. Ye, *Science* **322**, 231 (2008).
- [24] T. Takekoshi, L. Reichsöllner, A. Schindewolf, J. M. Hutson, C. R. Le Sueur, O. Dulieu, F. Ferlaino, R. Grimm, and H.-C. Nägerl, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 205301 (2014).
- [25] P. K. Molony, P. D. Gregory, Z. Ji, B. Lu, M. P. Köppinger, C. R. Le Sueur, C. L. Blackley, J. M. Hutson, and S. L. Cornish, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 255301 (2014).
- [26] J. W. Park, S. A. Will, and M. W. Zwierlein, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 205302 (2015).
- [27] M. Guo, B. Zhu, B. Lu, X. Ye, F. Wang, R. Vexiau, N. Bouloufa-Maafa, G. Quéméner, O. Dulieu, and D. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 205303 (2016).
- [28] T. M. Rvachov, H. Son, A. T. Sommer, S. Ebadi, J. J. Park, M. W. Zwierlein, W. Ketterle, and A. O. Jamison, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 143001 (2017).
- [29] S. Ospelkaus, K.-K. Ni, D. Wang, M. De Miranda, B. Neyenhuis, G. Quéméner, P. Julienne, J. Bohn, D. Jin, and J. Ye, *Science* **327**, 853 (2010).
- [30] K.-K. Ni, S. Ospelkaus, D. Wang, G. Quéméner, B. Neyenhuis, M. De Miranda, J. Bohn, J. Ye, and D. Jin, *Nature* **464**, 1324 (2010).
- [31] M. De Miranda, A. Chotia, B. Neyenhuis, D. Wang, G. Quéméner, S. Ospelkaus, J. Bohn, J. Ye, and D. Jin, *Nature Phys.* **7**, 502 (2011).
- [32] B. Drews, M. Deiß, K. Jachymski, Z. Idziaszek, and J. H. Denschlag, *Nat. Comm.* **8**, 14854 (2017).
- [33] A. Chotia, B. Neyenhuis, S. A. Moses, B. Yan, J. P. Covey, M. Foss-Feig, A. M. Rey, D. S. Jin, and J. Ye, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 080405 (2012).
- [34] B. Yan, S. A. Moses, B. Gadway, J. P. Covey, K. R. Hazzard, A. M. Rey, D. S. Jin, and J. Ye, *Nature* **501**, 521 (2013).
- [35] H. Häffner, C. Roos, and R. Blatt, *Phys. Rep.* **469**, 155 (2008).
- [36] K. Singer, U. Poschinger, M. Murphy, P. Ivanov, F. Ziesel, T. Calarco, and F. Schmidt-Kaler, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2609 (2010).
- [37] R. Blatt and C. Roos, *Nature Phys.* **8**, 277 (2012).
- [38] D. Leibfried, R. Blatt, C. Monroe, and D. Wineland, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 281 (2003).
- [39] J. I. Cirac and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4091 (1995).
- [40] C. Monroe, D. M. Meekhof, B. E. King, W. M. Itano, and D. J. Wineland, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4714 (1995).
- [41] F. Schmidt-Kaler, H. Häffner, M. Riebe, S. Gulde, G. P. Lancaster, T. Deuschle, C. Becher, C. F. Roos, J. Eschner, and R. Blatt, *Nature* **422**, 408 (2003).
- [42] C. Sackett, D. Kielpinski, B. King, C. Langer, V. Meyer, C. Myatt, M. Rowe, Q. Turchette, W. Itano, D. Wineland, *et al.*, *Nature* **404**, 256 (2000).
- [43] R. Gerritsma, G. Kirchmair, F. Zähringer, E. Solano, R. Blatt, and C. Roos, *Nature* **463**, 68 (2010).
- [44] J. T. Barreiro, M. Müller, P. Schindler, D. Nigg, T. Monz, M. Chwalla, M. Hennrich, C. F. Roos, P. Zoller, and R. Blatt, *Nature* **470**, 486 (2011).
- [45] S. Gulde, M. Riebe, G. P. Lancaster, C. Becher, J. Eschner, H. Häffner, F. Schmidt-Kaler, I. L. Chuang, and R. Blatt, *Nature* **421**, 48 (2003).
- [46] P. Schindler, J. T. Barreiro, T. Monz, V. Nebendahl, D. Nigg, M. Chwalla, M. Hennrich, and R. Blatt, *Science* **332**, 1059 (2011).
- [47] T. Monz, D. Nigg, E. A. Martinez, M. F. Brandl, P. Schindler, R. Rines, S. X. Wang, I. L. Chuang, and R. Blatt, *Science* **351**, 1068 (2016).
- [48] B. P. Lanyon, C. Hempel, D. Nigg, M. Müller, R. Gerritsma, F. Zähringer, P. Schindler, J. Barreiro, M. Rambach, G. Kirchmair, *et al.*, *Science* **334**, 57 (2011).
- [49] T. F. Gallagher, ed., *Rydberg Atoms* (Cambridge Univ. Press, 1994).
- [50] D. Jaksch, J. I. Cirac, P. Zoller, S. L. Rolston, R. Côté, and M. D. Lukin, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2208 (2000).
- [51] D. Tong, S. M. Farooqi, J. Stanojevic, S. Krishnan, Y. P. Zhang, R. Côté, E. E. Eyler, and P. L. Gould, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 063001 (2004).



- [52] E. Urban, T. A. Johnson, T. Henage, L. Isenhower, D. Yavuz, T. Walker, and M. Saffman, *Nature Physics* **5**, 110 (2009).
- [53] M. D. Lukin, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 457 (2003).
- [54] H. Weimer, M. Müller, I. Lesanovsky, P. Zoller, and H. P. Büchler, *Nature Physics* **6**, 382 (2010).
- [55] M. Saffman, T. G. Walker, and K. Mølmer, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2313 (2010).
- [56] M. Endres, H. Bernien, A. Keesling, H. Levine, E. R. Anschuetz, A. Krajenbrink, C. Senko, V. Vuletic, M. Greiner, and M. D. Lukin, *Science* **354**, 1024 (2016).
- [57] D. Barredo, S. de Léséleuc, V. Lienhard, T. Lahaye, and A. Browaeys, *Science* **354**, 1021 (2016).
- [58] C. H. Greene, A. S. Dickinson, and H. R. Sadeghpour, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2458.
- [59] V. Bendkowsky, B. Butscher, J. Nipper, J. P. Shaffer, R. Löw, and T. Pfau, *Nature* **458**, 1005 (2009).
- [60] A. Härter and J. H. Denschlag, *Contemp. Phys.* **55**, 33 (2014).
- [61] R. G. DeVoe, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 063001 (2009).
- [62] M. Cetina, A. T. Grier, and V. Vuletic, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 253201 (2012).
- [63] C. Schneider, M. Enderlein, T. Huber, and T. Schaetz, *Nat. Photon.* **4**, 772 (2010).
- [64] C. Cormick, T. Schaetz, and G. Morigi, *New J. Phys.* **13**, 043019 (2011).
- [65] T. Huber, A. Lambrecht, J. Schmidt, L. Karpa, and T. Schaetz, *Nat. Commun.* **5**, 5587 (2014).
- [66] C. Zipkes, S. Palzer, L. Ratschbacher, C. Sias, and M. Köhl, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 133201 (2010).
- [67] C. Zipkes, S. Palzer, C. Sias, and M. Köhl, *Nature* **464**, 388 (2010).
- [68] F. H. J. Hall, M. Aymar, N. Bouloufa-Maafa, O. Dulieu, and S. Willitsch, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 243202 (2011).
- [69] L. Ratschbacher, C. Zipkes, C. Sias, and M. Köhl, *Nat. Phys.* **8**, 649 (2012).
- [70] R. Gerritsma, A. Negretti, H. Doerk, Z. Idziaszek, T. Calarco, and F. Schmidt-Kaler, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 080402 (2012).
- [71] U. Bissbort, D. Cocks, A. Negretti, Z. Idziaszek, T. Calarco, F. Schmidt-Kaler, W. Hofstetter, and R. Gerritsma, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 080501 (2013).
- [72] H. Doerk, Z. Idziaszek, and T. Calarco, *Phys. Rev. A* **81**, 012708 (2010).
- [73] W. G. Rellergert, S. T. Sullivan, S. J. Schowalter, S. Kotochigova, K. Chen, and E. R. Hudson, *Nature* **495**, 490 (2013).
- [74] A. K. Hansen, O. Versolato, S. Kristensen, A. Gingell, M. Schwarz, A. Windberger, J. Ullrich, J. C. López-Urrutia, M. Drewsen, *et al.*, *Nature* **508**, 76 (2014).
- [75] T. Stoecklin, P. Halvick, M. A. Gannouni, M. Hochlaf, S. Kotochigova, and E. R. Hudson, *Nat. Commun.* **7**, 11234 (2016).
- [76] M. Germann, X. Tong, and S. Willitsch, *Nat. Phys.* **10**, 820 (2014).
- [77] H. Loh, K. C. Cossel, M. C. Grau, K.-K. Ni, E. R. Meyer, J. L. Bohn, J. Ye, and E. A. Cornell, *Science* **342**, 1220 (2013).
- [78] S. Willitsch, M. T. Bell, A. D. Gingell, and T. P. Softley, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10**, 7200 (2008).
- [79] Y.-P. Chang, K. Długołęcki, J. Küpper, D. Rösch, D. Wild, and S. Willitsch, *Science* **342**, 98 (2013).
- [80] T. Helgaker, P. Jorgensen, and J. Olsen, eds., *Molecular Electronic-Structure Theory* (Wiley, 2000).
- [81] R. J. Bartlett and M. Musial, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 291 (2007).
- [82] G. D. Purvis III and R. J. Bartlett, *J. Chem. Phys.* **76**, 1910 (1982).
- [83] P. J. Knowles, C. Hampel, and H.-J. Werner, *J. Chem. Phys.* **99**, 5219 (1993).
- [84] H. Werner and P. J. Knowles, *J. Chem. Phys.* **89**, 5803 (1988).
- [85] H.-J. Werner, P. J. Knowles, F. R. M. R. Lindh, M. Schütz, P. Celani, T. Korona, G. Rauhut, R. D. Amos, A. Bernhardsson, A. Berning, D. L. Cooper, M. J. O. Deegan, A. J. Dobbyn, E. G. F. Eckert, C. Hampel, G. Hetzer, A. W. Lloyd, S. J. McNicholas, W. Meyer, M. E. Mura, A. Nicklass, P. Palmieri, R. Pitzer, U. Schumann, H. Stoll, A. J. Stone, R. Tarroni, T. Thorsteinsson, M. Wang, and A. Wolf, *MOLPRO, version 2012.1, a package of ab initio programs* (2012), see <http://www.molpro.net>.
- [86] S. Boys and F. Bernardi, *Mol. Phys.* **19**, 553 (1970).
- [87] M. Dolg and X. Cao, *Chem. Rev.* **112**, 403 (2012).
- [88] B. Jeziorski, R. Moszynski, and K. Szalewicz, *Chem. Rev.* **94**, 1887 (1994).



- [89] M. Krych, W. Skomorowski, F. Pawłowski, R. Moszynski, and Z. Idziaszek, *Phys. Rev. A* **83**, 032723 (2011).
- [90] A. Derevianko, S. G. Porsev, and J. F. Babb, *At. Data Nucl. Data Tables* **96**, 323 (2010).
- [91] R. Moszynski, P. Zuchowski, and B. Jeziorski, *Collect. Czech. Chem. Commun.* **70**, 1109 (2005).
- [92] T. Korona, M. Przybytek, and B. Jeziorski, *Mol. Phys.* **104**, 2303 (2006).
- [93] H. T. C. Stoof, J. M. V. A. Koelman, and B. J. Verhaar, *Phys. Rev. B* **38**, 4688 (1988).
- [94] V. Kokoouline, O. Dulieu, R. Kosloff, and F. Masnou-Seeuws, *J. Chem. Phys.* **110**, 9865 (1999).
- [95] K. Willner, O. Dulieu, and F. Masnou-Seeuws, *J. Chem. Phys.* **120**, 548 (2004).
- [96] S. Kallush and R. Kosloff, *Chem. Phys. Lett.* **433**, 221 (2006).
- [97] B. R. Johnson, *J. Chem. Phys.* **69**, 4678 (1978).
- [98] R. Kosloff, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **45**, 145 (1994).
- [99] K. M. Jones, E. Tiesinga, P. D. Lett, and P. S. Julienne, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 483 (2006).
- [100] C. Chin, R. Grimm, P. S. Julienne, and E. Tiesinga, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1225 (2010).
- [101] T. Köhler, K. Góral, and P. S. Julienne, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 1311 (2006).
- [102] F. Ferlaino, A. Zenesini, M. Berninger, B. Huang, H.-C. Nägerl, and R. Grimm, *Few-Body Syst.* **51**, 113 (2011).
- [103] F. Chevy and C. Salomon, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **49**, 192001 (2016).
- [104] S. Falke, H. Knöckel, J. Friebe, M. Riedmann, E. Tiemann, and C. Lisdat, *Phys. Rev. A* **78**, 012503 (2008).
- [105] N. B. Jørgensen, L. Wacker, K. T. Skalmstang, M. M. Parish, J. Levinsen, R. S. Christensen, G. M. Bruun, and J. J. Arlt, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 055302 (2016).
- [106] J. S. Krauser, J. Heinze, S. Götze, M. Langbecker, N. Fläschner, L. Cook, T. M. Hanna, E. Tiesinga, K. Sengstock, and C. Becker, *Phys. Rev. A* **95**, 042701 (2017).
- [107] H.-Z. Chen, X.-C. Yao, Y.-P. Wu, X.-P. Liu, X.-Q. Wang, Y.-X. Wang, Y.-A. Chen, and J.-W. Pan, *Phys. Rev. A* **94**, 033408 (2016).
- [108] C.-H. Wu, I. Santiago, J. W. Park, P. Ahmadi, and M. W. Zwierlein, *Phys. Rev. A* **84**, 011601 (2011).
- [109] S. Roy, M. Landini, A. Trenkwalder, G. Semeghini, G. Spagnolli, A. Simoni, M. Fattori, M. Inguscio, and G. Modugno, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 053202 (2013).
- [110] R. J. Fletcher, R. Lopes, J. Man, N. Navon, R. P. Smith, M. W. Zwierlein, and Z. Hadzibabic, *Science* **355**, 377 (2017).
- [111] Y. Ashida, R. Schmidt, L. Tarruell, and E. Demler, *Phys. Rev. B* **97**, 060302 (2018).
- [112] A. Celi, P. Massignan, J. Ruseckas, N. Goldman, I. B. Spielman, G. Juzeliūnas, and M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 043001 (2014).
- [113] M. Mancini, G. Pagano, G. Cappellini, L. Livi, M. Rider, J. Catani, C. Sias, P. Zoller, M. Inguscio, M. Dalmonde, and L. Fallani, *Science* **349**, 1510 (2015).
- [114] B. K. Stuhl, H.-I. Lu, L. M. Aycock, D. Genkina, and I. B. Spielman, *Science* **349**, 1514 (2015).
- [115] C. R. Cabrera, L. Tanzi, J. Sanz, B. Naylor, P. Thomas, P. Cheiney, and L. Tarruell, *Science* **359**, 301 (2018).
- [116] P. Cheiney, C. R. Cabrera, J. Sanz, B. Naylor, L. Tanzi, and L. Tarruell, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 135301 (2018).
- [117] S. Inouye, M. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D. Stamper-Kurn, and W. Ketterle, *Nature* **392**, 151 (1998).
- [118] J. Werner, A. Griesmaier, S. Hensler, J. Stuhler, T. Pfau, A. Simoni, and E. Tiesinga, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 183201 (2005).
- [119] A. Griesmaier, J. Werner, S. Hensler, J. Stuhler, and T. Pfau, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 160401 (2005).
- [120] Z. Pavlović, R. V. Krems, R. Côté, and H. R. Sadeghpour, *Phys. Rev. A* **71**, 061402 (2005).
- [121] T. Lahaye, T. Koch, B. Fröhlich, M. Fattori, J. Metz, A. Griesmaier, S. Giovanazzi, and T. Pfau, *Nature* **448**, 672 (2007).
- [122] T. Koch, T. Lahaye, J. Metz, B. Fröhlich, A. Griesmaier, and T. Pfau, *Nat. Phys.* **4**, 218 (2008).
- [123] M. Lu, N. Q. Burdick, S. H. Youn, and B. L. Lev, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 190401 (2011).
- [124] M. Lu, N. Q. Burdick, and B. L. Lev, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 215301 (2012).
- [125] K. Aikawa, A. Frisch, M. Mark, S. Baier, A. Rietzler, R. Grimm, and F. Ferlaino, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 210401 (2012).
- [126] K. Aikawa, A. Frisch, M. Mark, S. Baier, R. Grimm, and F. Ferlaino, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 010404 (2014).



- [127] A. Petrov, E. Tiesinga, and S. Kotochigova, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 103002 (2012).
- [128] T. Maier, H. Kadau, M. Schmitt, M. Wenzel, I. Ferrier-Barbut, T. Pfau, A. Frisch, S. Baier, K. Aikawa, L. Chomaz, M. J. Mark, F. Ferlaino, C. Makrides, E. Tiesinga, A. Petrov, and S. Kotochigova, *Phys. Rev. X* **5**, 041029 (2015).
- [129] T. Maier, I. Ferrier-Barbut, H. Kadau, M. Schmitt, M. Wenzel, C. Wink, T. Pfau, K. Jachymski, and P. S. Julienne, *Phys. Rev. A* **92**, 060702 (2015).
- [130] T. Lahaye, C. Menotti, L. Santos, M. Lewenstein, and T. Pfau, *Rep. Prog. Phys.* **72**, 126401 (2009).
- [131] M. A. Baranov, M. Dalmonte, G. Pupillo, and P. Zoller, *Chem. Rev.* **112**, 5012 (2012).
- [132] A. Frisch, M. Mark, K. Aikawa, F. Ferlaino, J. L. Bohn, C. Makrides, A. Petrov, and S. Kotochigova, *Nature* **507**, 475 (2014).
- [133] K. Aikawa, S. Baier, A. Frisch, M. Mark, C. Ravensbergen, and F. Ferlaino, *Science* **345**, 1484 (2014).
- [134] M. Schmitt, M. Wenzel, F. Böttcher, I. Ferrier-Barbut, and T. Pfau, **539**, 259 (2016).
- [135] H. Kadau, M. Schmitt, M. Wenzel, C. Wink, T. Maier, I. Ferrier-Barbut, and T. Pfau, *Nature* **530**, 194 (2016).
- [136] S. Baier, M. Mark, D. Petter, K. Aikawa, L. Chomaz, Z. Cai, M. Baranov, P. Zoller, and F. Ferlaino, *Science* **352**, 201 (2016).
- [137] L. Ardila and T. Pohl, arXiv preprint arXiv:1804.06390 (2018).
- [138] F. Serwane, G. Zürn, T. Lompe, T. B. Ottenstein, A. N. Wenz, and S. Jochim, *Science* **332**, 336 (2011).
- [139] G. Zürn, F. Serwane, T. Lompe, A. N. Wenz, M. G. Ries, J. E. Bohn, and S. Jochim, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 075303 (2012).
- [140] A. Wenz, G. Zürn, S. Murmann, I. Brouzos, T. Lompe, and S. Jochim, *Science* **342**, 457 (2013).
- [141] G. Zürn, A. N. Wenz, S. Murmann, A. Bergschneider, T. Lompe, and S. Jochim, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 175302 (2013).
- [142] S. Murmann, F. Deuretzbacher, G. Zürn, J. Bjerlin, S. M. Reimann, L. Santos, T. Lompe, and S. Jochim, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 215301 (2015).
- [143] S. Murmann, A. Bergschneider, V. M. Klinkhamer, G. Zürn, T. Lompe, and S. Jochim, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 080402 (2015).
- [144] A. M. Kaufman, B. J. Lester, C. M. Reynolds, M. L. Wall, M. Foss-Feig, K. R. A. Hazzard, A. M. Rey, and C. A. Regal, *Science* **345**, 306 (2014).
- [145] A. M. Kaufman, B. J. Lester, M. Foss-Feig, M. L. Wall, A. M. Rey, and C. A. Regal, *Nature* **527**, 208 (2015).
- [146] L. R. Liu, J. T. Zhang, Y. Yu, N. R. Hutzler, Y. Liu, T. Rosenband, and K.-K. Ni, arXiv preprint arXiv:1701.03121 (2017).
- [147] L. R. Liu, J. D. Hood, Y. Yu, J. T. Zhang, N. R. Hutzler, T. Rosenband, and K.-K. Ni, *Science* (2018), 10.1126/science.aar7797.
- [148] A. Doçaj, M. L. Wall, R. Mukherjee, and K. R. A. Hazzard, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 135301 (2016).
- [149] M. L. Wall, R. Mukherjee, S. S. Alam, N. P. Mehta, and K. R. A. Hazzard, *Phys. Rev. A* **95**, 043636 (2017).
- [150] M. L. Wall, N. P. Mehta, R. Mukherjee, S. S. Alam, and K. R. A. Hazzard, *Phys. Rev. A* **95**, 043635 (2017).
- [151] R. Saito, S. Haze, M. Sasakawa, R. Nakai, M. Raoult, H. Da Silva, O. Dulieu, and T. Mukaiyama, *Phys. Rev. A* **95**, 032709 (2017).
- [152] V. Bendkowsky, B. Butscher, J. Nipper, J. B. Balewski, J. P. Shaffer, R. Löw, T. Pfau, W. Li, J. Stanojevic, T. Pohl, and J. M. Rost, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 163201 (2010).
- [153] A. Gaj, A. T. Krupp, J. B. Balewski, R. Löw, S. Hofferberth, and T. Pfau, *Nat. Commun.* **5**, 4546 (2014).
- [154] B. Butscher, V. Bendkowsky, J. Nipper, J. B. Balewski, L. Kukota, R. Löw, T. Pfau, W. Li, T. Pohl, and J. M. Rost, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **44**, 184004 (2011).
- [155] F. Camargo, J. D. Whalen, R. Ding, H. R. Sadeghpour, S. Yoshida, J. Burgdörfer, F. B. Dunning, and T. C. Killian, *Phys. Rev. A* **93**, 022702 (2016).
- [156] A. T. Krupp, A. Gaj, J. B. Balewski, P. Ilzhöfer, S. Hofferberth, R. Löw, T. Pfau, M. Kurz, and P. Schmelcher, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 143008 (2014).
- [157] D. A. Anderson, S. A. Miller, and G. Raithel, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 163201 (2014).
- [158] H. Saßmannshausen, F. Merkt, and J. Deiglmayr, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 133201 (2015).
- [159] F. Böttcher, A. Gaj, K. M. Westphal, M. Schlagmüller, K. S. Kleinbach, R. Löw, T. C. Liebisch, T. Pfau, and S. Hofferberth, *Phys. Rev. A* **93**, 032512 (2016).



- [160] W. Li, T. Pohl, J. M. Rost, S. T. Rittenhouse, H. R. Sadeghpour, J. Nipper, B. Butscher, J. B. Balewski, V. Bendkowsky, R. Löw, and T. Pfau, *Science* **334**, 1110.
- [161] M. A. Bellos, R. Carollo, J. Banerjee, E. E. Eyler, P. L. Gould, and W. C. Stwalley, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 053001 (2013).
- [162] D. Booth, S. T. Rittenhouse, J. Yang, H. R. Sadeghpour, and J. P. Shaffer, *Science* **348**, 99 (2015).
- [163] K. S. Kleinbach, F. Meinert, F. Engel, W. J. Kwon, R. Löw, T. Pfau, and G. Raithel, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 223001 (2017).
- [164] T. Niederprüm, O. Thomas, T. Eichert, C. Lippe, J. Pérez-Ríos, C. H. Greene, and H. Ott, *Nat. Comm.* **7**, 12820 (2016).
- [165] NIST Atomic Spectra Database <http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD>.
- [166] H. da Silva Jr, M. Raoult, M. Aymar, and O. Dulieu, *New J. Phys.* **17**, 045015 (2015).
- [167] O. P. Makarov, R. Côté, H. Michels, and W. W. Smith, *Phys. Rev. A* **67**, 042705 (2003).
- [168] L. Ratschbacher, C. Sias, L. Carcagni, J. M. Silver, C. Zipkes, and M. Köhl, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 160402 (2013).
- [169] T. V. Tscherbul, P. Brumer, and A. A. Buchachenko, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 143201 (2016).
- [170] F. H. J. Hall and S. Willitsch, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 233202 (2012).
- [171] J. Deiglmayr, A. Göritz, T. Best, M. Weidemüller, and R. Wester, *Phys. Rev. A* **86**, 043438 (2012).
- [172] L. González-Sánchez, F. Carelli, F. Gianturco, and R. Wester, *Chem. Phys.* **462**, 111 (2015).
- [173] L. Gonzalez-Sanchez, M. Tacconi, E. Bodo, and F. Gianturco, *Eur. Phys. J. D* **49**, 85 (2008).
- [174] M. Tacconi and F. A. Gianturco, *J. Chem. Phys.* **131**, 094301 (2009).
- [175] J. N. Byrd, H. H. Michels, J. A. Montgomery, and R. Côté, *Phys. Rev. A* **88**, 032710 (2013).
- [176] L. González-Sánchez, F. A. Gianturco, F. Carelli, and R. Wester, *New J. Phys.* **17**, 123003 (2015).
- [177] R. Otto, J. Mikosch, S. Trippel, M. Weidemüller, and R. Wester, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 063201 (2008).
- [178] D. Gerlich and G. Borodi, *Faraday Discuss.* **142**, 57 (2009).
- [179] D. Hauser, S. Lee, F. Carelli, S. Spieler, O. Lakhmanskaya, E. S. Endres, S. S. Kumar, F. Gianturco, and R. Wester, *Nat. Phys.* **11**, 467 (2015).
- [180] D. Mulin, S. Roucka, P. Jusko, I. Zymak, R. Plasil, D. Gerlich, R. Wester, and J. Glosik, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 8732 (2015).
- [181] D. Hauser, O. Lakhmanskaya, S. Lee, S. Roucka, and R. Wester, *New J. Phys.* **17**, 075013 (2015).
- [182] E. Bodo, E. Scifoni, F. Sebastianelli, F. A. Gianturco, and A. Dalgarno, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 283201 (2002).
- [183] T. Stoecklin and A. Voronin, *J. Chem. Phys.* **134**, 204312 (2011).
- [184] E. S. Endres, O. Lakhmanskaya, D. Hauser, S. E. Huber, T. Best, S. S. Kumar, M. Probst, and R. Wester, *J. Phys. Chem. A* **118**, 6705 (2014).
- [185] M. Larsson, W. D. Geppert, and G. Nyman, *Rep. Prog. Phys.* **75**, 066901 (2012).
- [186] S. Willitsch, *Int. Rev. Phys. Chem.* **31**, 175 (2012).
- [187] M. Lemeshko, R. V. Krems, J. M. Doyle, and S. Kais, *Mol. Phys.* **111**, 1648 (2013).
- [188] P. F. Staunum, K. Højbjerg, P. S. Skyt, A. K. Hansen, and M. Drewsen, *Nat. Phys.* **6**, 271 (2010).
- [189] X. Tong, A. H. Winney, and S. Willitsch, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 143001 (2010).
- [190] R. Schmidt and M. Lemeshko, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 203001 (2015).
- [191] R. Schmidt and M. Lemeshko, *Phys. Rev. X* **6**, 011012 (2016).
- [192] R. P. Feynman, *Phys. Rev.* **97**, 660 (1955).
- [193] F. Grusdt and E. Demler, *Quantum Matter at Ultralow Temperatures*, 325 (2015).
- [194] A. Schirotzek, C.-H. Wu, A. Sommer, and M. W. Zwierlein, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 230402 (2009).
- [195] S. Palzer, C. Zipkes, C. Sias, and M. Köhl, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 150601 (2009).
- [196] C. Kohstall, M. Zaccanti, M. Jag, A. Trenkwalder, P. Massignan, G. M. Bruun, F. Schreck, and R. Grimm, *Nature* **485**, 615 (2012).
- [197] M. Koschorreck, D. Pertot, E. Vogt, B. Fröhlich, M. Feld, and M. Köhl, *Nature* **485**, 619 (2012).
- [198] N. Spethmann, F. Kindermann, S. John, C. Weber, D. Meschede, and A. Widera, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 235301 (2012).
- [199] T. Fukuhara, A. Kantian, M. Endres, M. Cheneau, P. Schauß, S. Hild, D. Bellem, U. Schollwöck, T. Giamarchi, C. Gross, *et al.*, *Nature Physics* **9**, 235 (2013).



- [200] R. Scelle, T. Rentrop, A. Trautmann, T. Schuster, and M. K. Oberthaler, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 070401 (2013).
- [201] M. Cetina, M. Jag, R. S. Lous, J. T. M. Walraven, R. Grimm, R. S. Christensen, and G. M. Bruun, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 135302 (2015).
- [202] M.-G. Hu, M. J. Van de Graaff, D. Kedar, J. P. Corson, E. A. Cornell, and D. S. Jin, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 055301 (2016).
- [203] M. Cetina, M. Jag, R. S. Lous, I. Fritsche, J. T. M. Walraven, R. Grimm, J. Levinsen, M. M. Parish, R. Schmidt, M. Knap, and E. Demler, *Science* **354**, 96 (2016).
- [204] R. C. Fortenberry, *J. Phys. Chem. A* **119**, 9941 (2015).
- [205] W. W. Smith, O. P. Makarov, and J. Lin, *J. Mod. Opt.* **52**, 2253 (2005).
- [206] W. Smith, D. Goodman, I. Sivarajah, J. Wells, S. Banerjee, R. Cote, H. Michels, J. A. Mongtomery, and F. Narducci, *Appl. Phys. B* **114**, 75 (2014).
- [207] F. H. Hall, P. Eberle, G. Hegi, M. Raoult, M. Aymar, O. Dulieu, and S. Willitsch, *Mol. Phys.* **111**, 2020 (2013).
- [208] F. H. Hall, M. Aymar, M. Raoult, O. Dulieu, and S. Willitsch, *Mol. Phys.* **111**, 1683 (2013).
- [209] S. Haze, R. Saito, M. Fujinaga, and T. Mukaiyama, *Phys. Rev. A* **91**, 032709 (2015).
- [210] S. T. Sullivan, W. G. Rellergert, S. Kotochigova, and E. R. Hudson, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 223002 (2012).
- [211] S. Schmid, A. Härter, and J. Hecker Denschlag, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 133202 (2010).
- [212] W. G. Rellergert, S. T. Sullivan, S. Kotochigova, A. Petrov, K. Chen, S. J. Schowalter, and E. R. Hudson, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 243201 (2011).
- [213] M. Aymar, R. Guérout, and O. Dulieu, *J. Chem. Phys.* **135**, 064305 (2011).
- [214] B. M. McLaughlin, H. D. L. Lamb, I. C. Lane, and J. F. McCann, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47**, 145201 (2014).
- [215] E. R. Sayfutyarova, A. A. Buchachenko, S. A. Yakovleva, and A. K. Belyaev, *Phys. Rev. A* **87**, 052717 (2013).
- [216] H. D. L. Lamb, J. F. McCann, B. M. McLaughlin, J. Goold, N. Wells, and I. Lane, *Phys. Rev. A* **86**, 022716 (2012).
- [217] L. L. Yan, X. Y. Li, Y. Wu, J. G. Wang, and Y. Z. Qu, *Phys. Rev. A* **90**, 032714 (2014).
- [218] A. T. Grier, M. Cetina, F. Oručević, and V. Vuletić, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 223201 (2009).
- [219] K. Ravi, S. Lee, A. Sharma, G. Werth, and S. Rangwala, *Nat. Commun.* **3**, 1126 (2012).
- [220] D. S. Goodman, J. E. Wells, J. M. Kwolek, R. Blümel, F. A. Narducci, and W. W. Smith, *Phys. Rev. A* **91**, 012709 (2015).
- [221] P. S. Żuchowski, J. Aldegunde, and J. M. Hutson, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 153201 (2010).
- [222] D. A. Brue and J. M. Hutson, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 043201 (2012).
- [223] G. Herzberg, *Molecular Spectra and Molecular Structure: I. Spectra of Diatomic Molecules* (Krieger, 1989).
- [224] R. V. Krems, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10**, 4079 (2008).
- [225] Z. Idziaszek and P. S. Julienne, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 113202 (2010).
- [226] P. S. Żuchowski and J. M. Hutson, *Phys. Rev. A* **81**, 060703 (2010).
- [227] M. L. González-Martínez, O. Dulieu, P. Larrégaray, and L. Bonnet, *Phys. Rev. A* **90**, 052716 (2014).
- [228] L. Levin, W. Skomorowski, L. Rybak, R. Kosloff, C. P. Koch, and Z. Amitay, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 233003 (2015).

Michał Tomza