



Prof. dr hab. Andrzej L. Sobolewski
Instytut Fizyki, Polska Akademia Nauk
Al. Lotników 32/46, 02-668 Warszawa
Tel. (+48 22) 116 3210
Fax. (+48 22) 843 09 26

Warszawa, 28.07.2021

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Iwony Majewskiej
zatytułowanej:

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

Rozprawa doktorska mgr Iwony Majewskiej została wykonana na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego pod kierunkiem Profesora Roberta Moszyńskiego. Głównym celem pracy był opis teoretyczny własności spektroskopowych i fotofizycznych dimeru strontu w warunkach ultrazimnej pułapki optycznej oraz interpretacja eksperymentów przeprowadzonych we współpracującym zespole prof. Tanyi Zelvelinsky z Uniwersytetu Columbia w Nowym Jorku.

Rozprawa doktorska została napisana w języku angielskim i składa się z sześciu rozdziałów oraz spisu literatury. Jest uzupełniona o streszczenie w języku angielskim i języku polskim. Rozprawa zawiera 83 strony i odwołuje się do 371 pozycji literatury. Do pracy dołączono 5 oryginalnych prac współautorskich opublikowanych w wiodących czasopismach międzynarodowych.

Rozdział 1 pracy zawiera napisane w bardzo przystępnym stylu dogłębne wprowadzenie do tematyki ultrazimnych cząsteczek. Opisane zostały podstawowe metody ich wytwarzania i pułapkowania. Szczególny nacisk został położony na istniejące i potencjalne zastosowania tego typu materii.

W Rozdziale 2 autorka określa podstawowe motywacje i cele wykonanej pracy. Dość szczegółowo opisuje strukturę elektronową i ro-wibracyjną dimeru strontu (Sr_2) oraz sprzężenia pomiędzy nimi. Podsumowuje zastany stan wiedzy oraz nakreśla wyzwania związane z opisem teoretycznym eksperymentów przeprowadzonych przez współpracującą grupę z Columbia University.

Rozdział 3 poświęcony jest opisowi fotodysocjacji dimeru strontu ze szczególnym omówieniem różnych reżimów energetycznych, kwantowego i klasycznego, oraz przejścia pomiędzy nimi. Rozdział ten opiera się na wynikach teoretycznych doktorantki opublikowanych w pracach I i II.

W Rozdziale 4 omówiono wpływ zewnętrznego pola magnetycznego na rozkłady kątowe produktów fotodysocjacji dimeru strontu. Wprowadzono kwantowy model tego zjawiska, opisano zastosowaną metodykę obliczeń oraz omówiono uzyskane wyniki w kontekście wyjaśnienia obserwacji doświadczanych przedstawionych w pracy III.

W Rozdziale 5 zaprezentowano wyniki związane z opisem teoretycznym oraz optymalizacją zegara kwantowego opartego na cząsteczkach Sr_2 . Jest to obszerny rozdział zawierający zarówno wprowadzenie do zjawiska zegarów atomowych i molekularnych, omówienie zasady ich działania oraz ograniczeń związanych z procesami dezaktywacji stanów kwantowych. Rozdział ten opiera się na wynikach opublikowanych w pracach IV i V.

Rozdział 6 zawiera krótkie podsumowanie najważniejszych wyników pracy omawianych w poprzednich rozdziałach.

Ocena formalna rozprawy

Układ pracy jest logiczny, a poszczególne rozdziały i podrozdziały ilustrują w sposób przejrzysty prowadzoną dyskusję. Zamieszczone liczne wzory, rysunki i tabele stanowią mocną stronę rozprawy. Doktorantka swobodnie porusza się w świecie złożonych zagadnień związanych z fotofizyką ultrazimnych atomów i molekuł. Obszerny zestaw cytowanej literatury obejmuje zarówno wczesne publikacje związane z poruszaną tematyką, jak również prace późniejsze o fundamentalnym znaczeniu dla tej dziedziny wiedzy, po prace z ostatniego okresu. Spis literatury spełnia zatem kryteria staranności i kompletności.

Ocena merytoryczna rozprawy

Badania przeprowadzone w ramach niniejszej pracy znakomicie wpisują się w dynamicznie obecnie rozwijającą się tematykę badań nad ultrazimnymi atomami i cząsteczkami o szerokich potencjalnych zastosowaniach. Po starannym zapoznaniu się z rozprawą doktorską mgr Iwony Majewskiej stwierdzam, że główny cel pracy został dobrze zdefiniowany, a dobór materiałów i metod badawczych pozwolił na jego realizację. Doktoranta wykazała się dobrym przygotowaniem merytorycznym, znajomością literatury dotyczącej badanych zagadnień, dużą sprawnością teoretyczną, i jednocześnie wykazała umiejętność posługiwania się podstawowymi technikami obliczeniowymi chemii kwantowej. Zaprezentowane w pracy rezultaty badań uważam za bardzo wartościowe i stymulujące dla dalszego rozwoju tej dziedziny wiedzy.

Podsumowanie

Wyniki stanowiące podstawę pracy doktorskiej mgr Majewskiej zostały opublikowane w postaci pięciu artykułów w wiodących specjalistycznych czasopismach o wysokim IF (od 3.14 do 20.03, średni IF=10.13). We wszystkich tych artykułach doktoranta jest jedynym, nie licząc promotora, teoretykiem odpowiedzialnym za modelowanie wyników doświadczalnych. Pozostali autorzy są członkami zespołu eksperymentalnego. Według bazy Web of Science, prace te na dzień dzisiejszy uzyskały 40 cytowań, co jest b. zadawalającym wynikiem jak na tak krótki okres czasu. Oprócz pięciu prac włączonych do rozprawy doktorskiej mgr Iwona Majewska jest współautorką trzech dodatkowych prac; jednej opublikowanej w bieżącym roku w Phys. Chem. Chem. Phys. oraz opublikowanej w roku 2019 pracy w Phys. Rev. A i w roku 2016 pracy w Nature. Ta ostatnia praca uzyskała na dzień dzisiejszy 35 cytowań. Wszystkie 8 prac współautorstwa mgr Majewskiej były cytowane 77 razy (66 bez autocytowań), a jej indeks Hirscha wynosi 4, co jest rzadko spotykanym wynikiem przed obroną doktoratu.

Drobne nieścisłości i uchybienia, które zauważyłem dotyczą głównie strony formalnej prezentacji wyników i dyskusji prowadzonej w pracy, jako że nie czuję się wystarczająco kompetentny do oceny strony metodologicznej pracy, ponieważ nie śledzę na bieżąco literatury dotyczącej tej tematyki. Za najważniejszą nieścisłość pracy uważam brak bardziej szczegółowego opisu zastosowanych w obliczeniach metod chemii kwantowej, takich jak: zastosowana baza funkcyjna, ECP, itd. Może coś przeoczyłem, ale tych informacji nie

znalazłem również w oryginalnych pracach. Mam też drobną uwagę stylistyczną: Używane w pracy określenia „ground potential”, czy „excited potential” powinny być raczej zastąpione przez „ground-state potential” oraz odpowiednio „excited-state potential”.

Podsumowując; pomimo wyrażonych powyżej drobnych zastrzeżeń, uważam, że rozprawa doktorska mgr Iwony Majewskiej dowodzi dobrej znajomości tematyki dotyczącej fotofizyki ultrazimnych molekuł. Chciałbym szczególnie podkreślić wszechstronność doktorantki i biegłość jaką wykazała w stosowaniu różnorodnych metod teoretycznych w badaniu układów molekularnych, co w połączeniu z symulacjami teoretycznymi przeprowadzonymi w oparciu o metody chemii kwantowej, czynią pracę zupełnie wyjątkową w tej dziedzinie badań. Biorąc powyższe pod uwagę, stwierdzam, że przedłożona rozprawa doktorska spełnia ustawowe i zwyczajowe wymogi stawiane doktorantom i wnioskuję o dopuszczenie mgr Iwony Majewskiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Jednocześnie, mając na uwadze fakt, że większość wyników przedstawionych w pracy zostało opublikowane w wiodących czasopismach w danej dziedzinie nauki, a doktorantka jest w tych pracach autorem odpowiedzialnym za modelowanie teoretyczne wyników doświadczalnych i wcześniejsze z tych prac uzyskały już znaczne echo od środowiska naukowego w postaci dość licznych cytowań, wnioskuję o wyróżnienie pracy.



Andrzej Sobolewski

Załącznik:

- Uzasadnienie wniosku o wyróżnienie rozprawy doktorskiej.

Warszawa, dn. 28.07.2021

Uzasadnienie wniosku o wyróżnienie rozprawy doktorskiej mgr Iwony Majewskiej
zatytułowanej:

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

Wnioskuje o wyróżnienie recenzowanej rozprawy z następujących powodów:

- praca wpisuje się znakomicie w dynamicznie ostatnio rozwijającą się tematykę ultrazimnych atomów i cząsteczek,
- praca została wzorowo zredagowana i poszczególne rozdziały i podrozdziały ilustrują w sposób przejrzysty prowadzoną dyskusję,
- praca zawiera wyczerpującą literaturę związaną z poruszaną tematyką,
- zaprezentowane w pracy rezultaty badań teoretycznych uważam za bardzo wartościowe i stymulujące dla dalszego rozwoju tej dziedziny wiedzy,
- wyniki stanowiące podstawę rozprawy doktorskiej zostały opublikowane w postaci pięciu artykułów w wiodących czasopismach międzynarodowych o wysokim IF i uzyskały już znaczne echo od środowiska naukowego w postaci dość licznych cytowań.



Andrzej Sobolewski