

Warszawa, 05.10.2023 r.

dr hab. Emilia Witkowska
Instytut Fizyki PAN
Oddział Fizyki Teoretycznej
Aleja Lotników 32/46
02-668 Warszawa

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Klaudii Zaremby-Kopczyk
pt. „Toward Ultracold Molecules Containing Transition-Metal and Lanthanide Atoms:
Interatomic Interactions and Ultracold Collisions”**

Przedłożona mi do recenzji praca doktorska mgr Klaudii Zaremby-Kopczyk, której promotorem jest dr hab. Michał Tomza, powstała w Instytucie Fizyki Teoretycznej Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego. Rozprawa dotyczy teoretycznej analizy oddziaływań międzyatomowych i zderzeń w ultra-zimnych mieszaninach atomów metali przejściowych i lantanowców. W szczególności, Doktorantka analizuje możliwości kontrolowanego utworzenia ultra-zimnych dwuatomowych cząsteczek zawierających te atomy. Część naukowa pracy, oparta na oryginalnych wynikach Doktorantki, ma formę zbioru artykułów opublikowanych w specjalistycznych czasopismach naukowych i przedruków powiązanych ściśle z tematyką dysertacji.

Rozprawa dotyczy podstaw teorii międzyatomowych oddziaływań i zderzeń w mieszaninach ultra-zimnych atomów. Jest to dziedzina rozwijająca się dynamicznie w ostatnich latach, tworząca nową platformę do precyzyjnie kontrolowanych badań zjawisk kwantowych w zakresie fizyki czy też reakcji chemicznych, jak również testów podstawowych praw fizyki. Ultra-zimne mieszaniny atomów metali przejściowych czy też lantanowców oferują możliwość utworzenia cząsteczek, których elektryczny i magnetyczny moment dipolowy może być znacznie większy od momentów dipolowych typowych ultra-zimnych atomów badanych obecnie w laboratorium. Realizacja doświadczalnie tego typu układów pozwala na pionierskie badania w zupełnie nowym obszarze parametrów, i co się z tym wiąże, obserwację zjawisk rozważanych dotąd teoretycznie. Dodatkowo, są one obiecującą platformą do zastosowań w precyzyjnych pomiarach. Ultra-zimne mieszaniny atomów rozważane przez mgr Klaudię Zarembę-Kopczyk doskonale wpisują się w ten trend współczesnych badań. W mojej opinii, wyniki uzyskane przez Doktorantkę są ważne i przysłużą się rozwojowi dziedziny ultra-zimnych gazów atomowych i molekuł.

Recenzowana przeze mnie rozprawa doktorska mgr Klaudii Zaremby-Kopczyk została napisana w języku angielskim i liczy 106 stron łącznie z bibliografią. Składa się z czterech rozdziałów.

Pierwszym z nich jest wprowadzenie do fizyki ultra-zimnej materii przedstawiające typowe własności gazów atomowych oraz sposobów ich wytworzenia w laboratorium. Więcej uwagi Autorka poświęca charakterystyce ultra-zimnych molekuł wymieniając szereg możliwości ich produkcji, oraz możliwych zastosowań i perspektyw. Wprowadzenie zawiera również dyskusję natury oddziaływań dipolowych, istotnych w fizyce ultra-zimnych gazów atomowych i molekuł w kontekście prac Doktorantki.

Rozdział drugi zawiera przegląd znanych w literaturze metod analitycznych i numerycznych obejmujący szczegóły niezbędne do zrozumienia poszczególnych przybliżeń stosowanych do wyznaczenia struktury elektronowej cząsteczek, jak również zderzeń ultra-zimnych atomów. Metody te są standardowo stosowane do opisu tego typu zagadnień. Niemniej jednak, ich implementacja numeryczna nie jest trywialna i wymaga zaawansowanych umiejętności programistycznych oraz analitycznych.

Główna część rozprawy doktorskiej mgr Klaudii Zaremby-Kopczyk jest umieszczona w rozdziale trzecim w czterech podrozdziałach związanych bezpośrednio z opublikowanym artykułem lub przedrukami. Prezentacja manuskryptu danej publikacji poprzedzona jest bardzo krótkim komentarzem dotyczącym motywacji podjęcia badań oraz wkładu Doktorantki do prezentowanych wyników. Doktorantka stosuje przedstawione wcześniej metody do badań oddziaływań i zderzeń ultra-zimnych atomów. Jednym z ciekawszych wyników jest analiza rezonansów Feshbacha dla pary ultra-zimnych atomów europu (Eu) oraz pomiędzy europem a atomami litu (Li) i rubidu (Rb) metodą wielokanałowego rozpraszania kwantowego. Ważną okazuje się rola oddziaływań dipolowych, wzbogacając strukturę rezonansów. Innymi przykładami istotnych dla dziedziny wyników są obliczenia krzywej potencjału energii oraz elektrycznego momentu dipolowego dla molekuł dwuatomowych metodami *ab initio* chemii kwantowej. Również i w tych przypadkach, Doktorantka wykazała się umiejętnościami obliczeniowymi, zastosowała zewnętrzne biblioteki do opisu pseudo-potencjałów opisujących strukturę elektronową atomów oraz te wspomagające symulacje *ab initio*. Zakres pierwiastków rozważanych przez Doktorantkę jest szeroki co prowadzi do mnogości przypadków opisanych we wspomnianych publikacjach Autorki. Przykładowo, molekuły utworzone przez atomy cynku (Zn) lub kadmu (Cd) oddziałujące z atomami metali alkalicznych lub ziem alkalicznych tworzą związki typu van der Waals'a z relatywnie małym momentem dipolowym, natomiast te utworzone przez atom litu i chromu są silnie związane w stanie podstawowym i mają znaczący moment dipolowy. Szczegółowe badania Doktorantki w ostatnim przypadku zaowocowały opracowaniem nowego sposobu do

precyzyjnego próbkowania zmian ilorazu mas protonu i elektronu, który z pewnością zostanie zaimplementowany doświadczalnie w niedługim czasie.

Brakuje mi na wstępie tego rozdziału rozwiniętych komentarzy na temat celu poszczególnych rachunków, wyboru obserwacji i interpretacji otrzymanych wyników. Przykładowo, nie został w wystarczający sposób wyjaśniony specyficzny dobór atomów czy też poszczególnych wielkości charakteryzujących układ w kontekście badanych własności.

Podsumowując, rozprawa doktorska jest napisana przejrzysto i jasno. Pani Klaudia Zaremba-Kopczyk wykazała się znajomością fizyki ultra-zimnych gazów atomowych i molekuł, oraz zrozumieniem podstawowych metod ich opisu. Potrafi również przekazać swoją wiedzę w sposób jasny dla czytelnika prezentując tylko istotne informacje i zwracając uwagę na kluczowe elementy. Odpowiedni jest również dobór metod badawczych i analizy danych. Widać w nim szerokie spektrum narzędzi stosowanych przez Doktorantkę, od przybliżonych i ścisłych metod analitycznych poprzez różnorodne metody numeryczne. Bibliografia jest bogata i pokazuje dobrą orientację w literaturze. Słabym punktem rozprawy jest brak dłuższego komentarza na temat rezultatów badań naukowych. Przedstawienie wyników, ich krytyczna analiza i interpretacja na tle literatury znajduje się w poszczególnych publikacjach lub przeddrukach. Pełną wartość merytoryczną wyników prac naukowych Doktorantki można zatem docenić podczas lektury tychże publikacji. Trzeba jednak podkreślić, że jest to specyfika wybranej formy pracy doktorskiej jako zbioru artykułów opublikowanych w specjalistycznych czasopismach naukowych i przeddruków.

Pomimo powyższych uwag jakie nasunęły się podczas lektury, moja ocena pracy doktorskiej mgr Klaudii Zaremba-Kopczyk jest bardzo wysoka. Zawiera wyniki ważne i użyteczne w badaniach ultra-zimnych gazów atomowych i molekuł. W mojej opinii, spełnia wymogi ustawowe i zwyczajowe stawiane pracom doktorskim. W związku z czym wnioskuję o dopuszczenie mgr Klaudii Zaremba-Kopczyk do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



Emilia Witkowska