

Toruń, 5 maja 2019

dr hab. Piotr Żuchowski, Prof. UMK
Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej
Instytut Fizyki im A. Jabłońskiego
Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu
pzuch@fizyka.umk.pl

DZIEKANAT WYDZIAŁU FIZYKI
WPŁYNĘŁO

2019 -05- 08 JBiuł.

Recenzja pracy doktorskiej pana magistra Pawła Czachorowskiego

Представiona przez pana Czachorowskiego praca nosi tytuł „*Relativistic nonadiabatic corrections to the ground state of molecular hydrogen*” i została przygotowana pod kierownictwem prof. Krzysztofa Pachuckiego i dr. hab. Mariusza Puchalskiego (UAM). Praca powstała w wyjątkowej grupie badawczej, specjalizującej się w ultradokładnych obliczeniach własności spektroskopowych dla prostych molekuł i atomów, od wielu lat grupa ta jest przoduje na świecie oraz prowadzi niejako korespondencyjny pojedynek z grupami eksperymentalnymi co jakiś czas zmniejszając błąd wyznaczenia takich własności jak energia dysocjacji czy częstości przejść rowibracyjnych.

Pan Czachorowski w swojej pracy doktorskiej zajął się tylko jednym z takich układów, cząsteczką wodoru w stanie podstawowym. Jego praca skupiła się na jednej tylko poprawce do energii cząsteczki wodoru, wszelako nie jest to w żadnym razie praca przyczynkowa. Jest to pierwsze na świecie obliczenie relatywistyczne i nieadiabatyczne dla molekuly. Jest to praca bardzo pionierska, wymagająca świetnego warsztatu matematycznego i wymagająca dużych umiejętności programistycznych. Moim zdaniem mgr. Czachorowski wywiązał się z tego zadania znakomicie.

Rozprawa doktorska jest krótka i zwięzła. Podzielona jest na 7 rozdziałów i dodatki (appendiksy). Treść jest rozdzielona na rozdziały bardzo klarownie i logicznie co wiąże się z tym, że rozprawa jest bardzo silnie jednorodna tematycznie i jej głównym wynikiem jest zajęcie się jednym (za to jak bardzo ważnym!) problemem naukowym.

Pierwszy rozdział rozprawy stanowi wstęp, którego intencją jest przegląd eksperymentów związanych z molekułą H_2 oraz najważniejszych prac teoretycznych jakie zostały poświęcone temu układowi w ostatnich kilkudziesięciu latach. Moim zdaniem ta część pracy jest nieco skrótowa i mogłaby zawierać nieco więcej referencji do istniejących prac i nieco bardziej kompletny przegląd literatury. Na przykład nie ma wzmianki o eksperymentach Eyler i Melikechi [Phys. Rev. A 48, R18(R)] , Zhang i inni 2004 [Phys. Rev. Lett. 92, 203003], Chang & Zare - badania HT [J. Mol.Spec. 121, 380-400 (1987)]. Po stronie teorii: nie ma wzmianki o pracy Lutostława Wolniewicza z roku 1995 [„Nonadiabatic energies of the ground state of the hydrogen molecule”, J. Chem. Phys. 103, 1792 (1995)] ani wcześniejszych prac, nie ma odniesień do prac Rychlewskiego i współpracowników ani do prac grupy Adamowicza. Jakkolwiek te prace były by niekompletne (w dzisiejszego punktu widzenia) czy też niedoskonałe lub niepoprawne, można

było pokusić się o krytyczny przegląd istniejących prac. Biorąc pod uwagę że kandydat na stopień doktora ma do czynienia z jednym tylko układem, wykonanie nieco bardziej kompletnego przeglądu literatury powinno być bardzo łatwe. Warto zauważyć że Umiejętność ta może przydać się w przyszłości, jeśli kandydat będzie zajmował się nadal pracą naukową (a ma do tego oczywiście znakomite predyspozycje) powinien potrafić opisywać istniejący stan wiedzy w publikacjach czy wnioskach grantowych.

Rozdział 2 i 3 rozprawy to przegląd dwóch metod istniejących obok siebie: nierelatywistycznej elektrodynamiki kwantowej (rozdział 2) i nieadiabatycznego rachunku zaburzeń (rozdział 3). W trakcie rozdziału 3 w podrozdziale 3.3 ukazuje się nam bardzo ważny schemat (Rys. 3.1) dokładnie wyjaśniający obecny stan wiedzy oraz teorię która jest rozwinięta w Rozprawie. Do tej teorii która sprzęga QED i nieadiabatyczny rachunek zaburzeń. Autor rozprawy jest współautorem publikacji w Phys. Rev. Lett. na temat obliczeń QED dokładnych do szóstego rzędu.

Rozdział 4 zawiera główną część pracy, czyli wyprowadzenie poprawki nieadiabatycznej QED. Szczegółowe wyprowadzenie przeniesione zostało do dodatku A. Jedynym zastrzeżeniem jakie mam do tej części pracy jest podrozdział 4.4 zatytułowany „Large R asymptotics” który podaje jedynie limity w nieskończoności poprawek X, Y, Z i V (z rozdziału 4.3), nie podaje jak one zachowują się dla dużych R , co ma duże znaczenie dla stanów wysokowzbudzonych pod progiem dysocjacji. W dzisiejszych eksperymentach ma to duże znaczenie w badaniu np. rezonansów w zderzeniach zminych atomów wieloelektronowych. Innymi słowy, czy możliwe jest określenie jak poprawki omawiane w 4.3 dążą do limitu i jak dąży cała poprawka. Czy dążą one do stałych z różnymi potęgami? Czy możliwe jest chociażby numeryczne zbadanie tego faktu? Jeśli jest gdzieś wzmianka w tekście rozprawy odnośnie asymptotyki całej poprawki $\mathcal{G}^{(4,1)}(R)$ powinna się znaleźć właśnie tutaj z omówieniem lub referencjami. Rozdział 5 zawiera techniczny opis baz, procesu optymalizacji parametrów baz oraz szacowania błędu związanego z ich obcięciem. Skrótowe i pobieżne potraktowanie niektórych ważnych własności symetrii - mogłoby się przydać wyjaśnienie dlaczego (5.36) postać orbitali dla stanów Π jest taka a nie inna. W trakcie samej obrony chętnie usłyszałbym komentarz odnośnie perspektywy metody rozwinięcia energii w potęgę (m_e/μ_n) w świetle nowej pracy w której Puchalski, Komasa, Czachorowski i Pachucki obliczyli bez rozwijania, wariacyjnie [Phys. Rev. Lett. **122**, 103003]. Czy temat został już wyczerpany? Dla jakich problemów rozwinięcie w szereg stosunku mas wciąż będzie miało zastosowanie?

Rozdział 6 opisuje sposób uzyskiwania poziomów energetycznych molekuł (H_2 HD, D2) metodą DVR. Zawiera opis publikacji Colberta i Millera, wyprowadzenie elementów macierzowych i przedstawia program w fortranie (załączony do pracy) do obliczeń. Rozdział ten jest bardzo zrozumiale napisany, sama praca Colberta i Millera stanowi dla mnie przykład zrozumiałego opisu metody, natomiast rozdział w rozprawie p. Czachorowskiego jest jeszcze bardziej zrozumiały. Jedynym małym brakiem jest omówienie zbieżności z rozmiarem gridu DVR, choć w przypadku lekkiej molekuly rozmiary gridów są zawsze bardzo małe (choć obliczenia skalują się z 3 potęgą liczby punktów na gridzie). Zwracam uwagę na to że równanie 6.18 nie było jeszcze publikowane, zawiera one nowe człony związane z nieadiabatycznym podejściem.

Całość pracy podsumowuje rozdział 7 „Summary and Conclusions” którego, w moim odczuciu, najbardziej wartościową częścią jest dyskusja wciąż istniejących niezgodności między teorią i eksperymentem. Niezgodności te dotyczą n.p. cząsteczki HD. Doktorant wyraża stwierdzenie że po stronie teoretycznej być może błędnie oszacowana niepewność (linia 1 i 2 str

76). Argumentuje, że implementacja poprawki $\mathcal{G}^{(5,1)}(R)$ może pomóc lepiej oszacować taką niepewność. Przydałoby się podać jakąś dyskusję możliwych niepewności po stronie eksperymentalnej, choć zdaję sobie sprawę że nie należy tego wymagać od doktoranta specjalizującego się w fizyce teoretycznej. Zachęcam jednak Doktoranta do zapoznawania się eksperymentami w szczegółach by lepiej poznawać ich ograniczenia.

Od strony technicznej i językowej cała praca jest bardzo starannie napisana i jej jednorodność i zwarta treść sprawiają że czyta się ją świetnie. Lektura tej pracy powinna być przyjemna również dla studentów stopnia pierwszego i drugiego. W mojej opinii może stanowić bardzo dobry materiał dydaktyczny dla studentów-specjalizantów w fizyce atomowej, molekularnej i chemii kwantowej. Napisana jest bardzo dobrym językiem angielskim. Należy zauważyć bardzo bogate i barwne słownictwo Doktoranta, choć chwilami ocierające się o luźny, potoczny styl. Autor posiłkuje się rzadko spotykanymi słowami co powoduje ożywienie tekstu, zaciekawienie i sympatię po stronie czytających. Mam jedynie kilka wątpliwości co do uzasadnionego użycia niektórych słów i fraz w tekście. (lista przedstawiona osobno - dosłownie kilka poprawek).

Podsumowując, przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska zasługuje na bardzo wysoką ocenę. Napisana jest niemal bezbłędnie, ma zwartą strukturę, i dobrą kompozycję. Praca dotyczy jednego, bardzo trudnego do rozwiązania problemu fizycznego. Problem ten został rozwiązany i stanowi niezwykle ważny wkład do aktualnie uprawianej nauki. To jak bardzo aktualna jest to tematyka pokazuje poniższy fakt: w marcu 2019 ukazała się kolejna praca p Czachorowskiego (współautorska) w Phys. Rev. Letters, z którą równocześnie opublikowano najlepsze do tej pory pomiary energii dysocjacji cząsteczki H_2 (grupy Merkta i Ubachsa). Ogółem, poza pierwszoautorską publikacją w Phys. Rev. A, która ma największy związek z prezentowaną pracą dokorską, Paweł Czachorowski jest współautorem dwóch publikacji w Phys. Rev. Lett.

Z pełnym przekonaniem wnoszę więc o dopuszczenie Pana Pawła Czachorowskiego do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Jedyną małą wątpliwością jaką można mieć po zapoznaniu się z dorobkiem pana Czachorowskiego jest to czy ta praca powinna być wyróżniona - i to tylko ze względu na ilościowy dorobek. Moim zdaniem nie należy jednak oceniać doktoranta wyłącznie poprzez pryzmat „punktozy”: doktorant podjął się zgłębiania bardzo trudnego tematu, rozwiązał problem i go świetnie opisał, w dodatku wyniki te były podyktowane niejako „wyścigiem” z grupami eksperymentalnymi - stąd też konieczność skupienia się na problemie aż do jego rozwiązania i zaniechanie jakichkolwiek badań będących przyczynkiem do prac wieloautorskich.

Stąd też skieruję do Rady Wydziału propozycję o wyróżnienie rozprawy pana Pawła Czachorowskiego (załączam oddzielny wniosek).

podpisano:



dr hab. Piotr Żuchowski, prof. UMK

Appendix:

spis błędów językowych i sugestia poprawy:

In major part of quantum chemistry - > In majority of quantum chemistry

„major part”

„said” - wydaje mi się że to określenie mało spotykane w języku naukowym (jest bardziej prawne i biznesowe) (str 50 pod równaniem 5.32, 54 pod 5.54, przedostatnia linia na 61,)

drugi paragraf str 50, ostatnie zdanie - powtórzenie „probable” probably” - poprawiłbym na „A possible cause”

str 20. pierwsze zdanie ostatniego paragrafu

„This is a good point at which to stress that NAPT is in general not equivalent to the expansion....” - > zdanie źle zbudowane, np. wyrzucenie „at which” załatwi sprawę

Toruń, 5 maja 2019

dr hab. Piotr Żuchowski, Prof. UMK
Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej
Instytut Fizyki im A. Jabłońskiego
Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu
pzuch@fizyka.umk.pl

DZIEKANAT WYDZIAŁU FIZYKI
WPŁYNEŁO

2019 -05- 08 MBiul.

Dziekan Wydziału Fizyki
Uniwersytetu Warszawskiego
prof. dr hab. Dariusz Wasik

Rada Wydziału Fizyki
Uniwersytetu Warszawskiego

Wniosek o wyróżnienie rozprawy doktorskiej

Wnoszę o wyróżnienie rozprawy doktorskiej pana Pawła Czachorowskiego „*Relativistic nonadiabatic corrections to the ground state of molecular hydrogen*”. Swój wniosek uzasadniam wyróżniającym się dorobkiem doktoranta - 3 publikacje, jedna pierwszoautorska, dwie w prestiżowym Phys. Rev. Lett. . Ponadto, wagę jednej z nich podkreślają ostatnie doświadczenia opublikowane w dokładnie tym samym czasie przez grupę eksperymentalną w Amsterdamie - jestem pewien że te prace na długie lata staną się bardzo rozpoznawalne w swojej dziedzinie. Jeżeli więc oceniać dorobek doktoranta nie wedle „punktozy” a poprzez pryzmat faktycznej wagi wyników jest to bezsprzecznie rozprawa zasługująca na wyróżnienie.



dr hab. Piotr Żuchowski, prof. UMK