

Prof. dr hab. Tadeusz Stacewicz  
Instytut Fizyki Doświadczalnej  
Uniwersytetu Warszawskiego  
00-681 Warszawa, ul. Hoża 69

**Recenzja pracy doktorskiej mgr Nguyen Huy Bang**  
**pt. *Investigation of electronic states of the NaLi molecule***  
***by polarization labeling spectroscopy***

Dwuatomowe cząsteczki złożone z atomów metali alkalicznych należą do stosunkowo prostych układów kwantowych. Są one wdzięcznym obiektem badań teoretycznych, gdyż względna niezłożoność pozwala tworzyć ich modele, dość wiernie oddające rzeczywistą budowę. Weryfikacja tych modeli odbywa się na drodze doświadczalnej, i co ciekawe, rezultaty pomiarów są z dokładnością o kilka rzędów wielkości przewyższają wyniki teoretyczne. Możliwość dobrego porównania doświadczenia z teorią, jaka może się w tej dziedzinie odbyć, ma znaczenie nie tylko dla poznania budowy tych cząsteczek: pozwala lepiej zrozumieć naturę wiązań chemicznych i stanowi test ich kwantowomechanicznego opisu. Szczególnie ostatnio obserwuje się duży postęp w badaniach cząsteczek. Nastąpiło to, dzięki możliwościom, jakie dają współczesna spektroskopia laserowa i metoda wiązek molekularnych w połączeniu z innymi technikami optyki instrumentalnej i elektroniki. Postęp jest także związany z rosnącym zainteresowaniem cząsteczkami, wynikającym z możliwości zastosowania rezultatów badań. Na przykład, duże zainteresowanie molekułami tego typu zauważa się wśród fizyków, zajmujących się kondensatem Bose-Einsteina.

W Polsce jedną z wiodących grup, zajmujących się spektroskopią cząsteczek dwuatomowych, jest zespół naukowców z Instytutu Fizyki Doświadczalnej Uniwersytetu Warszawskiego i Instytutu Fizyki Polskiej Akademii Nauk kierowany przez prof. dr hab. Pawła Kowalczyka i prof. dr hab. Włodzimierza Jastrzębskiego. Wykonana w tym zespole praca doktorska mgr Nguyen Huy Bang dotyczy spektroskopii cząsteczek NaLi. Molekuły te są interesujące, gdyż są najprostszymi alkalicznymi cząstkami heteronuklearnymi. Posiadają trwałe moment dipolowy. Jednak trudności doświadczalne sprawiły, że w porównaniu z innymi dwuatomowymi cząstkami alkalicznymi zostały słabo zbadane; niewiele jest też dla

nich wyników teoretycznych. Przedmiot rozprawy należy więc do „gorących” tematów współczesnej optyki.

Praca składa się z czterech zasadniczych rozdziałów. Pierwszy z nich to wstęp, w którym autor wyjaśnia znaczenie badania dwuatomowych alkalicznych cząsteczek heterojądrowych i krótko omawia podstawowe osiągnięcia pracy. W rozdziale drugim przedstawiono kwantowomechaniczny opis cząsteczek dwuatomowych, używane w nim przybliżenia, własności potencjałów stosowanych w tym opisie oraz techniki ich modelowania, a także - klasyfikacje stanów elektronowych cząsteczki i reguły wyboru dla przejść między tymi stanami. Na końcu, w podrozdziale 2.6, omówiono dodatkowe efekty występujące w widmach cząstek, będące przyczyną niezgodności obserwacji z przewidywaniami przybliżenia Borna – Oppenheimera. Uważam, że niezbyt szczęśliwie nazwano je zaburzeniami (*perturbations in molecular spectra*). Nie przeczę, że do opisania tych niezgodności używa się rachunku zaburzeń, jednak zjawiska fizyczne, czyli wymienione tu efekty elektrostatyczne, efekty nieadiabatyczne, sprzężenie spin – orbita, efekty rotacyjne, nie powinny być nazywane zaburzeniami. Są zjawiskami, których prostsze modele nie ujmują. W optyce atomowej stosuje się wtedy termin „poprawka” (*correction*).

W rozdziale trzecim przedstawiono teorię spektroskopii znakowania polaryzacyjnego, wykorzystywanej w niniejszej pracy. Jest to jedna z najbardziej precyzyjnych technik spektroskopii laserowej używanych do badania cząsteczek. Opisano także układ doświadczalny. Podkreślić należy, że autorzy podjęli się trudnego zadania, gdyż wydajnie wytwarzanie cząstek NaLi odbywa się w skrajnie nieprzyjaznych warunkach. Problemem jest nie tylko operowanie z pierwiastkami bardzo agresywnymi chemicznie lecz także to, że koncentracje atomów par tych pierwiastków osiągają porównywalne wartości w znacząco różniących się temperaturach. Eksperyment powiódł się dzięki zastosowaniu trójsekcyjnej komórki typu heat – pipe, w której sekcja wewnętrzna wypełniona była parami litu, a sekcje zewnętrzne – parami sodu. Dzięki odpowiedniemu doborowi temperatur w tych sekcjach, w sekcji centralnej koncentracje par sodu i litu były porównywalne i tam dochodziło do powstawania cząstek NaLi. Podwójny heat – pipe był wykorzystywany już w tej grupie wcześniej do wytwarzania molekuł KLi, jednak warto o nim wspomnieć, bo rozwiązanie wyżej wymienionych problemów jest istotnym osiągnięciem zespołu. W pomiarach laserem pompującym był impulsowy generator parametryczny, a do próbkowania wykorzystano impulsowy laser barwnikowy. Absolutną wartość długości fali lasera pompującego określano za pomocą interferometru Fabry – Perota, odnosząc się jednocześnie do widma optogalwanicznej lampy argonowej.

Rozdział czwarty, po krótkim wprowadzeniu przedstawiającym wcześniejsze badania cząstek NaLi, zawiera opis przeprowadzonych przez autora doświadczeń i analizę wyników. W kolejnych podrozdziałach doktorant przedstawia wyniki badań następujących stanów tej cząsteczki:  $4^1\Sigma^+$ ,  $3^1\Pi$ ,  $4^1\Pi$ ,  $5^1\Pi$  oraz  $6^1\Pi$ . Dla każdego stanu przeprowadzono rejestrację widm, dokonano rozpoznania linii w nich występujących, a na tej podstawie wyznaczono stałe molekularne (t.j. odległość międzyjądrową w stanie równowagi i głębokość jamy potencjału) ewentualnie współczynniki Durhama (określające energie poziomów w zależności od liczby oscylacyjnej i rotacyjnej), oraz kształty energii potencjału. Na końcu rozdziału dokonano porównania tych rezultatów z obliczeniami teoretycznymi, bardzo „gorącymi”, bo opublikowanymi w sierpniu 2008 roku.

Osiągnięcia pracy są znaczące. Wszystkie stany o symetrii  $^1\Pi$ , które objęły doświadczenia opisane w tej dysertacji, nie były wcześniej przez nikogo badane. Stan  $4^1\Sigma^+$ , choć wcześniej obserwowany, został w przez doktoranta przestudiowany z dużą precyzją. Przeanalizowano dla niego około 200 przejść, dzięki czemu możliwe było zweryfikowanie poprawności obliczeń teoretycznych i pośredniego potwierdzenia, że prawidłowe są dla niego przewidywania potencjału o podwójnym minimum. Dobrą zgodność przewidywanych i zmierzonych potencjałów osiągnięto także dla stanów o symetrii  $^1\Pi$ .

Zwraca uwagę bardzo staranne opracowanie wyników, wysoka dokładność badań, duża dbałość o precyzję. Ważne jest także krytyczne podejście do własnych danych i wskazywanie niedostatków osiągniętych rezultatów. Dzięki temu autor osiągnął wyniki mające istotną wartość naukową i stanowiące podstawę do wykorzystania ich do testowania teoretycznych modeli cząstek.

Nie udało się niestety autorowi uniknąć drobnych potknięć i niedoskonałości. I tak, stwierdzenie ze str. 29, że: *spin orbit interactions appear due to coupling among spins of electrons and the angular momenta caused by moving electrons and the rotating molecule* jest nieprawdziwe. Pierwsza część zdania sugeruje, że oddziaływanie spin – orbita to mechaniczne (żyroskopowe) sprzężenie momentów pędu elektronu: spinowego i orbitalnego. W drugiej części zdania – równie nieprawdziwej - uwzględnia się jeszcze do tego rotacyjny ruch molekuł. Oddziaływanie spin – orbita polega na oddziaływaniu elektrodynamicznym: spinowego momentu magnetycznego elektronu z polem magnetycznym molekuly powstałym wskutek ruchu ładunków, jakimi są elektrony i jadra atomów tworzące molekułę.

Praca jest napisana dobrym językiem i niezłym stylem. Można by stwierdzić, że czyta się ją łatwo, gdyby nie nadmierna ilość używanych w niej akronimów. Obok skrótów powszechniej przyjętych i używanych w środowisku optyków (Nd:YAG, OPO/OPA,

interferometr FP, lampa HC, PD), czy też skrótów znanych szerzej głównie osobom zajmującym się spektroskopią molekularną (np. RKR), autor wprowadził około 8-miu własnych akronimów: BO, PEC, PLS, DRMSD, IPA, SVD, DPotFit, MLR<sup>1</sup>. Żonglowanie w tekście pracy tymi skrótami doprowadza do zdań takich, jak „...we compared the MLR potential with the IPA PEC”. To bardzo utrudnia czytanie rozprawy, szczególnie, gdy wraca się do niej po kilku tygodniach. Trzeba wtedy odszukać strony, na których te akronimy zostały zdefiniowane. Myślę, że praca nie stała by się zbyt rozwlekła, gdyby z tych akronimów w większości zrezygnowano. A w dodatku nie zamieszczono listy skrótów z wyjaśnieniami ich znaczeń, choć na początku rozprawy zamieszczono – moim zdaniem, niezbyt potrzebne, spisy tablic i rysunków, Przydała by się także i lista symboli matematycznych.

Ogółem edycyjna strona pracy jest staranna, czytelne opisane są zawarte w niej liczne rysunki. Recenzent zauważył tylko drobne błędy we wzorach (np. 2.8) i nieznaczące nieścisłości w opisie układu doświadczalnego. Jak jest szerokość linii próbującego lasera barwnikowego i czy ma ona znaczenie dla eksperymentu ?

Podsumowując stwierdzam, że dysertacja mgr Nguyen Huy Bang jest ciekawa nowatorska i bardzo pożyteczna. Wspomniane powyżej niedostatki, głównie natury językowej, w niczym nie obniżają mojej bardzo dobrej oceny tej pracy. Zawarte w niej wyniki są testami dla modeli teoretycznych: zarówno tych, które istnieją, jak i przyszłych. Rozprawa wskazuje rozbieżności między wynikami teoretycznymi i doświadczalnymi, przez co jest ważnym wkładem do dyskusji na temat struktury energetycznej badanych cząsteczek, Testem jakości osiągniętych w niej wyników jest to, że zostały one już opublikowane w czterech artykułach naukowych w czasopismach o zasięgu międzynarodowym.

**Stwierdzam więc, że rozprawa mgr Nguyen Huy Bang pt. *Investigation of electronic states of the NaLi molecule by polarization labeling spectroscopy* spełnia warunki określone w *Ustawie o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz stopniach i tytule w zakresie sztuki*. Wnioskuje o dopuszczenie tej pracy do dalszych etapów przewodu doktorskiego.**

Tadeusz Stacewicz



---

<sup>1</sup> Wyjaśnienia skrótów – w tekście rozprawy .....