

Gdańsk 19.05.2026

dr hab. Paweł Możejko, prof. PG
Zakład Fizyki Zderzeń Elektronowych
Instytut Fizyki i Informatyki Stosowanej
Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej
Politechnika Gdańska
ul. Gabriela Narutowicza 11/12
80-233 Gdańsk

RECENZJA ROZPRAWY DOKTORSKIEJ

mgr Marcina Umińskiego

pt. „**Decaying Feshbach Resonances in Complex Ultracold Systems**”

Praca doktorska mgr Marcina Umińskiego zatytułowana „Decaying Feshbach Resonances in Complex Ultracold Systems” zrealizowana została w Instytucie Fizyki na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej, Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu pod kierunkiem promotora dr hab. Piotra Żuchowskiego, prof. UMK oraz promotora pomocniczego dr inż. Mateusza Borkowskiego.

Celem pracy doktorskiej, jak podaje autor jest przedstawienie szczegółowych informacji na temat niuansów związanych z rozpadem stanów rezonansowych Feshbacha w ultrazimnych układach złożonych. W rozprawie analizowana są stany związane oraz stany rezonansowe Feshbacha mogące pojawiać się w ultrazimnych zderzeniach wybranych układów fizycznych ($\text{He}+\text{Li}$, $\text{Li}+\text{Er}$, $\text{K}+\text{Dy}$ oraz $\text{Sr}+\text{SrOH}$). Dyskutowane są również możliwości ich dostrajania oraz ewentualnych zastosowań. Tematyka podjęta w pracy doktorskiej jest ważna zważywszy na wykorzystanie magnetycznych stanów rezonansowych Feshbacha w eksperymentach z ultrazimnymi układami atomowymi lub cząsteczkowymi. Ogólnie stany rezonansowe Feshbacha opisują rozpraszanie rezonansowe dwóch cząstek, których wspólna energia jest bliska energii stanu związanego tych dwóch cząstek. Magnetyczny rezonans Feshbacha pozwalają precyzyjnie kontrolować oddziaływania między cząsteczkami w ultrazimnych gazach (o temperaturach rzędu ułamka mikrokelwina). Dzięki temu możliwa jest

zamiana swobodnych atomów w cząsteczki oraz badanie egzotycznych stanów materii, takich jak kondensaty Bosego-Einsteina. Stąd też celowe są prace teoretyczne i obliczeniowe dla wielu układów atom-atom, atom-cząsteczka charakteryzujące stany związane tych układów oraz ich zależność w zewnętrznym polu magnetycznym.

Licząca 114 stron, rozprawa doktorska, przygotowana w języku angielskim, składa się z 7 części, obejmujących wprowadzenie do rezonansów typu Feshbacha, prezentację uzyskanych wyników (części od 2 do 6) oraz podsumowanie. Całość uzupełniają wykazy tabel oraz rysunków oraz zestawienie wykorzystanej w rozprawie literatury obejmujące 229 pozycji.

Od strony formalnej oceniana rozprawa doktorska jest poprawna. Natomiast autor nie ustrzegł się drobnych błędów edycyjnych. Przykładowo cytowania w głównym tekście pracy rozpoczynają się od pracy [5] (prace [1]-[4] występują wcześniej w spisie rysunków), w kilku miejscach brakuje spacji przed cytowaniem (np. str. 4, str. 8), w kilku miejscach cytowanie jest po kropce kończącej zdanie, w niektórych miejscach szwankuje uporządkowanie przywoływanej literatury (np. na str. 23 mamy [17,7,8,18,147]), nie zawsze wyrównany jest prawy margines. Na stronie 6 przed równaniem 1.7 brakuje poprawnego cytowania. Te drobne uchybienia wskazują na pośpiech w redakcji pracy. Moje większe zastrzeżenia budzi zestawienie cytowanej literatury. Jest ono bardzo bogate, dodatkowo autor podaje tytuły prac. Niestety od strony edycyjnej jest ono niedopracowane. Ograniczę się tu do wybranych przykładów. W wielu tytułach występują niedociągnięcia w pisowni i tak znajdujemy „Bose-einstein” np. w ref. [5], [8], [9], [10] itd. lub nawet „bose-einstein” w ref. [14]. Podobnie jest z pisownią nazwiska „Feshbach”, np. w ref. [62], [110], [111], [130], znajdujemy zapis „feshbach”. Zapisy „numerov method”, „numerov algorithms”, „schroedinger equation”, „van der waals cation” czy też pisownia symboli pierwiastków lub symboli cząsteczek małymi literami (h₂, d₂, o₂ np. w [143] lub he, ne, ar, kr w [142]) również nie są poprawne. Referencja [24] ma błędną listę autorów „A.collaboration” nie jest pierwszym autorem tej pracy, w tym przypadku powinno być „The ACME Collaboration”, referencja [85] i [146] to odwołanie do tej samej pracy, a referencja [45] jest niepełna. Formatowanie referencji [192] jest błędne dzięki czemu ten odnośnik jest mało czytelny. Być może te uchybienia wynikają z wykorzystanego do sporządzania zestawienia oprogramowania. Nie umniejszają one samego zestawienia literatury, ale utrudniają jego percepcję.

Rozdział pierwszy rozprawy to wprowadzenie do rezonansów Feshbacha w kontekście ultrazimnych zderzeń pomiędzy atomami i cząsteczkami. Jest on jednocześnie bardzo zwięzłym i siłą rzeczy hasłowym (w części 1.1 i 1.2, zajmujących łącznie nieco ponad cztery strony, przywołano ponad 70 pozycji literaturowych) przeglądem najważniejszych osiągnięć w tym obszarze. W rozdziale tym zaprezentowane są również podstawy teoretyczne, w tym potencjał oddziaływania, przybliżenie Borna-Oppenheimera, metoda ścisłego sprzężenia (close-coupling), koncepcje stanów związanych oraz rezonansowych. Znajduję się w nim również krótkie przedstawienie stanów rezonansowych typu shape oraz Feshbacha. Rozdział ten wieńczy prezentacja motywacji i celu pracy. Mimo wszystko szkoda, że autor nie zdecydował się na oddzielny rozdział poświęcony szczegółowej prezentacji wykorzystanych metod teoretycznych. Zaprezentowanie, w tak skrótowy sposób, wykorzystanych metody, mimo że pozwala na ich rozpoznanie i ocenę ich stosowalności w badanym zagadnieniu, to niestety nie w pełni pomagają w percepcji kolejnych rozdziałów pracy. W tej prezentacji autor nie ustrzegł się też znaczących uproszczeń. W części 1.3.1 pierwsze zdanie to „We start solving the Schroedinger equation by splitting the movement of atomic nuclei and electrons” brakuje zatem zwięzłego zdefiniowania opisywanego problemu i pozostaje on jedynie domyślny z kontekstu tej części pracy. W wielu wzorach brakuje objaśnień. Oczywiście dla czytelnika zaznajomionego z tematyką pracy nie jest to znaczące utrudnienie, jednakże osłabia znaczenie edukacyjne ocenianej rozprawy. Przykładowo, w równaniach 1.3 oraz 1.4 wykorzystywane są inne współrzędne, co nie jest odnotowane i opisane. Dodatkowo w pierwszym członie równania 1.3 niefortunnie umieszczony jest znak minus. W równaniu 1.7 nie ma informacji, że $T=T_1+T_2+T_3+...$ jest operatorem wzbudzeń. W dyskusji potencjału V , odpowiednio równania 1.9 oraz 1.11 pojawia się operator v , który jednak nie występuje w tych równaniach. Bardzo proszę autora o komentarz dotyczący tych nieścisłości oraz doprecyzowanie współrzędnych p z równań 1.12 oraz 1.13 oraz zakresów wskaźników sumacyjnych we wzorach od 1.31 do 1.33.

Wyniki wykonanych przez autora obliczeń zaprezentowane są w rozdziałach od 2 do 6. W każdym z nich autor, krótko opisuje stan wiedzy, podaje wybrane szczegóły obliczeniowe, prezentuje wyniki wraz z ich dyskusją oraz krótko podsumowuje całość. Rozdział drugi poświęcony jest oddziaływaniu jonu NO^+ z cząsteczkowym wodorem. Dla tego układu autor prezentuje wyniki obliczeń powierzchni energii potencjalnej (PES), stanów związanych oraz analizę rotacyjno-wibracyjną. Część ta, w zamyśle autora ma głównie zaprezentować techniki

obliczeniowe wykorzystane w dalszej części pracy. Obliczenia PES mają tu naturę ab initio z wykorzystaniem metody jawnie skorelowanych sprzężonych klastrow (CCSD(T)-F12a) oraz bazy cc-pVTZ-F12. Energie stanów związanych zostały wyznaczone z wykorzystaniem programu BOUND. Część trzecia poświęcona jest prezentacji obliczeń ultrazimnych zderzeń pomiędzy atomami He i Li. Autor prezentuje w nim uzyskane stany związane oraz ich czas życia. Kolejne dwie części poświęcone są prezentacji obliczeń dla układów złożonych z atomów litu (Li) i erbu (Er) oraz potasu (K) i dysprozu (Dy). Tu znajdujemy już pełniejszą analizę stanów rezonansowych obejmującą również dyskusję dotyczącą dopasowania ich pozycji. Obliczenia te wykonane są dla pola magnetycznego zmieniającego się w zakresie od 0G do 1000G. Badany jest też wpływ skalowania potencjału na stany rezonansowe. Rozdział szósty poświęcony jest analizie stanów rezonansowych towarzyszących ultrazimnym zderzeniom atomów strontu (Sr) z cząsteczkami monowodorotlenku strontu (SrOH). W tej części autor dodatkowo dyskutuje możliwe mechanizmy odpowiedzialne za występowanie rezonansów Feshbacha dla tego układu. Rozdział siódmy to bardzo zwięzłe podsumowanie pracy.

Mgr Marcin Umiński jest współautorem dwóch publikacji naukowych. Są one bezpośrednio związane z tematyką zaprezentowaną w rozprawie doktorskiej. Te współautorskie prace, pochodzące odpowiednio z roku 2021 oraz 2025, zostały opublikowane w indeksowanych międzynarodowych czasopismach naukowych *Chemical Physics Letters* (Cahit Orek, Marcin Umiński, Jacek Kłos, François Lique, Piotr S. Żuchowski, Niyazi Bulut „NO⁺ + H₂: Potential energy surface and bound state calculations” Chem. Phys. Lett **771** (2021) 138511) oraz w *Physical Chemistry Chemical Physics* (Maciej B. Kosicki, Mateusz Borkowski, Marcin Umiński, Piotr S. Żuchowski ”Production of ultracold asymmetric tops from Sr atoms and SrOH molecules” Phys. Chem. Chem. Phys. **27** (2025) 25389–25404). Zaprezentowane w nich wyniki, dotyczące układów NO⁺+H₂ oraz Sr+SrOH, stanowią odpowiednio podstawę części 2 oraz 6 prezentowanej rozprawy doktorskiej. Doktorant jest w nich odpowiednio drugim oraz trzecim autorem, a deklarowany wkład wniesiony w powstanie tych prac pokrywa się z tematyką doktorską. Wyniki obliczeń zaprezentowane w rozdziałach 4 i 5 mogą z powodzeniem stanowić podstawę kolejnych publikacji.

Niewątpliwie zastosowany w pracy model fizyczny oraz przeprowadzone obliczenia mają swoje fizyczne uzasadnienie. W obliczeniach wykorzystane zostały narzędzia takie jak MOLSCAT, program do obliczeń dotyczących niereaktywnego rozpraszania w zderzeniach

atomowych i molekularnych (CPC **241** (2019) 9), BOUND oraz FIELD, oprogramowanie do obliczeń stanów związanych kompleksów złożonych z dwóch oddziałujących cząstek z wykorzystaniem metody ścisłego sprzężenia, w funkcji energii lub pól zewnętrznych (CPC **241** (2019) 1), powszechnie wykorzystywane w obliczeniach tego typu. Wskazane, przykładowe, niedociągnięcia rozprawy doktorskiej nie mają wpływu na jakość uzyskanych i prezentowanych rezultatów. Należy podkreślić, że większości przypadków prezentowane przez autora wyniki są jednymi z pierwszych rezultatów tego typu dla badanych w pracy układów. Wyniki te niewątpliwie są interesujące dla grup doświadczalnych pracujących w tym obszarze. Mogą być również inspirujące dla zespołów teoretycznych. Niezależnie od tego oczekuję zaprezentowania przez autora, w czasie obrony, szczegółowej informacji o zastosowanej w obliczeniach metodologii na wybranym przykładzie np. w przypadku zderzeń atomów strontu (Sr) z monowodorotlenkiem strontu (SrOH).

Uzyskanie wyników będących podstawą recenzowanej rozprawy doktorskiej wymagało od doktoranta specjalistycznej wiedzy z zakresu fizyki, w szczególności fizyki teoretycznej, technik obliczeniowych z zakresu fizyki i chemii kwantowej oraz metod numerycznych. Wskazuje to jednoznacznie na jego odpowiednią wiedzę w zakresie dyscypliny nauki fizyczne. Ponad to, uzyskane i zaprezentowane wyniki należy uznać za oryginalne rozwiązanie przez autora postawionego przed niego problemu naukowego.

Podsumowując, stwierdzam, że przedstawiona mi do recenzji praca mgr Marcina Umińskiego pt. „Decaying Feshbach Resonances in Complex Ultracold Systems” spełnia warunki i wymagania stawiane rozprawom doktorskim określone w ustawie Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20 lipca 2018 r. (z późn. zm.) i wnoszę do Rady Dyscypliny Nauki Fizyczne Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej, UMK o dopuszczenie jej do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Paweł Możejko



Signed by /
Podpisano przez:
Paweł Możejko
Politechnika Gdańska
Date / Data: 2026-
05-21 15:29