

**Recenzja pracy doktorskiej mgr Nguyen Huy Bang zatytułowanej:**

**„Investigation of electronic states of the NaLi molecule  
by polarization labelling spectroscopy”**

Spektroskopia laserowa wysokiej zdolności rozdzielczej przenosi bardzo istotne informacje o budowie świata – w znacznym stopniu zbudowanego z cząsteczek dwuatomowych. Cząsteczki metali alkalicznych intensywnie badane były w latach 30-tych ubiegłego stulecia. Potem renesans nastąpił gdy lasery umożliwiły znaczne dokładniejsze wyznaczenie przebiegu krzywych potencjalnych. Prace spektroskopowe prowadzone przez grupę pracującą pod opieką profesorów Kowalczyka i Jastrzębskiego dzięki stworzonemu warsztatowi doświadczalnemu i metodom wyznaczania przebiegu potencjału z położenia linii widmowych są obecnie najlepsze w świecie. Kontynuacją długiej listy osiągnięć tego zespołu jest praca doktorska Nguyen Huy Banga.

**Kompozycja pracy.**

Rozprawa doktorska składa się z pięciu rozdziałów, każdy podzielony jest na podrozdziały. Rozdziały wstępne 1 i 2 poświęcone są:

Opisowi literaturowemu widm cząsteczek dwuatomowych, stałym molekularnym i potencjałom stosowanym w pracy, regułom wyboru i zakłóceniom (perturbation) widm Część 3 (Polarization labelling spectroscopy and experimental arrangement) poświęcona jest opisowi stosowanej metody doświadczalnej, czyli spektroskopii laserowego znakowania polaryzacyjnego: zasadom metody, wytwarzaniu cząsteczek NaLi, wreszcie opisowi laserów i geometrii układu doświadczalnego.

Część 4 (Experimental results for the NaLi molecule) zawiera opis najpierw wyników prac otrzymanych przez innych autorów, potem opisano układ stanów elektronowych badanych w pracy.

Następnie przedyskutowano metody analizowania stanów obserwowanych w recenzowanej pracy. Podrozdziały y szczegółowe poświęcone są odpowiednio stanom

4.3. -  $4^1\Sigma^+$ , 4.4. -  $3^1\Pi$ , 4.5. -  $4^1\Pi$  i 4.6. -  $5^1\Pi$  i stanowi  $6^1\Pi$

Wszystkie informacje podane są w sposób ustandaryzowany: sposób obserwacji i dopasowania widm, otrzymane stałe cząsteczkowe i krzywe energii potencjalnej.

Rozdział 4.7 poświęcony jest ocenie stosowalności do otrzymanych wyników doświadczalnych najnowszych prac teoretycznych ilustrując fakt, że o przydatności teorii zawsze stanowi wynik doświadczalny

**Zawartość merytoryczna pracy.**

Spektroskopia znakowania polaryzacyjnego została użyta do badania rowibronowej struktury kilku wzbudzonych stanów elektronowych dwuatomowej cząsteczki hetero jądrowej NaLi. Badane stany elektronowe typu  $^1\Pi$  nie były wcześniej obserwowane,

Warto również podkreślić, że do sierpnia roku nie było opublikowanych obliczeń teoretycznych dotyczących tych stanów. Jednak na podstawie własności widm udało się wyznaczyć symetrię każdego z tych stanów a następnie poprzez analizę numeryczną obliczyć stałe cząsteczkowe (Dunhama) i zrekonstruować krzywą energii potencjalnej.

Oprócz czterech stanów  $3^1\Pi$ , zbadano również znane stany  $4^1\Sigma^+$  ..Ponieważ techniki badawcze stosowane w niniejszej pracy pozwoliły zebrać większą liczbę danych pozwoliło to przestudiować dokładniej niż poprzednio ww stany.

W obszarze widmowym  $26000-36300\text{ cm}^{-1}$  zaobserwowano 5 stanów elektronowych które mogą być wprost wzbudzone optycznie ze stanu podstawowego (singlet  $\Sigma^+$ ,  $\Pi$ ).

W ramach opisywanego w pracy doświadczenia zostały użyte przestrajalne lasery barwnikowe umożliwiające wybór wielu przejść próbnych w stanach  $4^1\Sigma^+$ .

Otrzymano więc dane pozwalające dokładniej wyznaczyć regularną część dwu minimowego stanu  $4^1\Sigma^+$ .

Otrzymane widma stanów pochodzące od  $3^1\Pi$  and  $4^1\Pi$  stanów pokazały istnienie lokalnego zaburzenia wpływającego na linie  $P$ - i  $R$ -  $v = 1, 2$  poziomów oscylacyjnych stanu  $3^1\Pi$ . Ponieważ w pracach teoretycznych przewidywano, że krzywe energii potencjalnej stanów  $6^1\Sigma^+$  and  $3^1\Pi$  przecinają się w pobliżu dna krzywej potencjału  $3^1\Pi$  oczekiwano, że lokalne zaburzenie będzie głównie poprzez sprzężenie nieadiabaticzne między stanami  $3^1\Pi$  i  $6^1\Sigma^+$  states. Okazało się, że krzywe energii stanów  $3^1\Pi$  and  $4^1\Pi$  wyznaczone metodą RKR zawierają istotne informacje (równowagą odległość międzyjądrową, położenia poziomów oscylacyjnych), i są dostatecznie dokładne by móc je porównać z zależnościami teoretycznymi. Jednak aby otrzymać dostatecznie dokładne krzywe energii potencjalnej (PEC) reprodukujące użyta została metoda odwróconych zaburzeń (inverse perturbation approach). Następnie zostało sprawdzone, że dane doświadczalne dotyczące stanów  $3^1\Pi$  and  $4^1\Pi$  są reprodukowane z dokładnością doświadczalną. Ponieważ współczynniki dyspersji dla daleko zasięgowych stanów  $3^1\Pi$  zostały obliczone teoretycznie spróbowano połączyć część daleko zasięgową potencjału . Dlatego użyto do tego potencjałów daleko zasięgowych Morse'a.

Należy zauważyć z olbrzymią przyjemnością, że otrzymane z doświadczenia wyniki odbiegają w znacznym stopniu od opublikowanych przebiegów teoretycznych. Tak więc istnieje konieczność przeprowadzenia badań teoretycznych jeszcze raz, by teoria zgadzała się z doświadczeniem.

## Podsumowanie.

Praca doktorska mgr Nguyen Huy Bang liczy pięć rozdziałów, opatrzona jest zwięzłym wstępem i podsumowaniem pokazującym bogactwo wykonanych prac i zastosowanych metod. Dodatkowo zawiera spis wykresów i tabel. Spis literatury zawiera 80 pozycji stosownych do zakresu pracy. Język pracy jest zwięzły i zrozumiały.

Zawartość merytoryczna jest bardzo bogata, różnorodna i pokazująca jak wiele problemów spektroskopii laserowej wysokiej zdolności rozdzielczej i metod teoretycznych i numerycznych należy dziś użyć by otrzymane wyniki były na najlepszym światowym poziomie. Poziom ten zapewnił zespół prowadzący badania i promotor, profesor Jastrzębski.

Nguyen Huy Bang pokazał, że jego praca i cierpliwość może doprowadzić do powstania dobrego doktoratu, wykorzystując wiedzę i doświadczenie doskonałych poprzedników i opiekunów a zarazem wnosząc indywidualne wartości.

Dlatego uważam, że rozprawa Nguyen Huy Banga spełnia wszystkie wymogi dotyczące prac doktorskich.