

dr hab. Wojciech Szajna, prof. UR
Uniwersytet Rzeszowski
Instytut Nauk Fizycznych
Katedra Badań Materiałowych i Spektroskopowych
ul. Pigoń 1, 35-310 Rzeszów
e-mail: wszajna@ur.edu.pl

Rzeszów, 03.03.2024 r.

Recenzja osiągnięć naukowych

pt. „Struktura elektronowa cząsteczki KCs” oraz „Struktura energetycznej dimerów bipolarnych zawierających atom strontu” przedstawionych przez dra Jacka Szczepkowskiego ubiegającego się o stopień doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne

Habilitant, dr Jacek Szczepkowski, legitymuje się dyplomem doktorskim nadanym w 2009 roku przez Wydział Fizyki i Astronomii Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu na podstawie przedłożonej i obronionej z wyróżnieniem rozprawy doktorskiej pt. „*The cold collisions of lithium isotopes and sodium atoms in the magneto-optical trap*”. Promotorami pracy byli dr Laurentius Windholz, prof. TU Graz oraz dr hab. Ewa Paul-Kwiek, prof. AP. Z Instytutem Fizyki PAN w Warszawie dr Jacek Szczepkowski związany jest od roku 2009, gdzie obecnie pracuje jako adiunkt w Zespole Spektroskopii Laserowej kierowanym przez prof. dra hab. Włodzimierza Jastrzębskiego.

Ocena osiągnięć naukowych

Dr Jacek Szczepkowski jako podstawę swojego wniosku o nadanie stopnia dra hab. przedstawił dwa osiągnięcia naukowe w postaci: cyklu 9 powiązanych tematycznie publikacji [A1-A9] pod wspólnym tytułem „Struktura elektronowa cząsteczki KCs” oraz cyklu 2 publikacji [B1, B2] opatrzonych tytułem „Struktura energetycznej dimerów bipolarnych zawierających atom strontu”.

Prace z pierwszego cyklu zostały opublikowane w latach 2012-2022 w renomowanych czasopiśmie o globalnym zasięgu i dobrych współczynnikach wpływu (IF): *Journal of Molecular Spectroscopy* (1 praca), *Chemical Physics Letters* (3 prace), *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* (4 prace) oraz *Spectrochimica Acta* (1 praca). We wszystkich współautorskich pracach [A1-A5, A7-A9] Habilitant jest pierwszym i korespondencyjnym autorem, praca [A6] jest pracą jednoautorską. Obie prace z cyklu drugiego ukazały się 2018 roku odpowiednio w *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* [B1] oraz *Physical Chemistry Chemical Physics* [B2] - praca otrzymała wyróżnienie „*Editors' choice*”. Przytoczone przez Habilitanta w pkt. IV Autoreferatu współczynniki bibliometryczne, które jak wiemy nie oddają w pełni wartości naukowej prac, są w mojej ocenie więcej niż zadowalające dla potrzeb postępowania habilitacyjnego.

Wkład Habilitanta w powstanie wszystkich jedenastu prac [A1-A9] oraz [B1, B2] został przez niego szczegółowo opisany, a porównanie z treścią oświadczeń współautorów nie budzi zastrzeżeń, co do tego, że w każdym przypadku był to wkład istotny. Na podkreślenie zasługuje fakt, że we wszystkich pracach Habilitant był odpowiedzialny za sformułowanie problemu badawczego oraz opracowanie koncepcji prowadzenia badań. Ten wkład Habilitanta został jeszcze zwiększony poprzez jego dominujący udział w części doświadczalnej prac poprzez kierowanie/prowadzenie sesji pomiarowych oraz budowę nowych lub modyfikację istotnych elementów układu pomiarowego, napisanie niezbędnego oprogramowania oraz koordynowanie prac współpracujących zespołów [B1, B2].

Ocena osiągnięcia 1

Prace doświadczalne prowadzone przez dra Jacka Szczepkowskiego, których rezultaty zostały zaprezentowane w artykułach [A1-A9] koncentrują się wokół wykorzystania techniki spektroskopii

polaryzacyjnej laserowego znakowania poziomów (PLS, *Polarization Labelling Spectroscopy*) do otrzymywania widm dimeru KCs syntetyzowanego w termicznym źródle typu heat-pipe. Obszar badań obejmował zarówno singletowe jak i trypletowe elektronowe stany wzbudzone, leżące w rejonie ok. 12 000 – 24 000 cm⁻¹ powyżej minimum stanu podstawowego (Rys. 1 w Autoreferacie).

Wybór przedmiotu badań był wynikiem podjętej przez dra Szczepkowskiego krytycznej analizy ówczesnego stanu prac, zarówno teoretycznych jak i eksperymentalnych, nad tą konkretną heterojądrową cząsteczką zawierającą atomy metali alkalicznych. Doprowadziło to do sformułowania jasnych celów badawczych, które wielokrotnie wybrzmiewają w treści Autoreferatu jako „dokładne poznanie struktury energetycznej cząsteczki KCs” – co istotnie wpłynęłoby na planowanie i realizację doświadczeń z otrzymywaniem ultrazimnych molekuł.

Pozytywna realizacja założonych celów stała się możliwa dzięki zaimplementowaniu przez Habilitanta bardzo całościowej i efektywnej procedury badawczej. Poczynając od wielokrotnie sprawdzonej dla innych dimerów metali alkalicznych spektroskopii PLS, dającej duże „pokrycie” głębokości badanych stanów elektronowych oraz ich „obserwację” z rozdzieleniem pełnej struktury oscylacyjno-rotacyjnej. Dość wspomnieć, iż w badanym w pracy [A1] stanie 4¹Σ⁺ obserwowano poziomy rotacyjne bliskie $J'=100$ dla v' sięgającego aż 91. Tym samym Habilitant otrzymał obszerny materiał badawczy, w postaci doświadczalnych wartości energii termów oscylacyjno-rotacyjnych (niepewność zazwyczaj poniżej 0.1 cm⁻¹) w kilkunastu stanach elektronowych będących przedmiotem obserwacji. Kolejnym krokiem była konstrukcja krzywych energii potencjalnej stanów elektronowych, wymienionych przez Habilitanta na str. 12 Autoreferatu, z wykorzystaniem tzw. odwrotnego podejścia perturbacyjnego (IPA, *Inverted Perturbation Approach*). W celu minimalizacji ewentualnego wpływu zaburzonych poziomów na kształt fitowanych krzywych potencjalnych zastosowano „metodę ważoną” [A3, A4, A6], w której waga indywidualnego poziomu jest iteracyjnie modyfikowana przez jego odchylenie od dopasowywanego modelu. Otrzymane doświadczalnie potencjały są wielokrotnie graficznie porównywane [A2-A8] z krzywymi potencjalnymi otrzymanymi metodami *ab initio*. Jak się wydaje może to stanowić dodatkowy, istotny profit z badań Habilitanta, o którym warto wspomnieć, a jakim jest weryfikacja wyników obliczeń teoretycznych za pomocą danych doświadczalnych.

Opisany powyżej schemat badawczy jest bardzo zbliżony we wszystkich 9 pracach [A1-A9] pierwszego osiągnięcia naukowego. Nie jest to jednak zarzut, a raczej - w pozytywnym ujęciu - potwierdzenie planowanej i konsekwentnie realizowanej pracy Habilitanta pracy nad uzyskaniem jak najszerszych i jak najbardziej kompleksowych rezultatów opisujących strukturę elektronową stanów wzbudzonych cząsteczki KCs oraz oddziaływań występujących pomiędzy nimi.

W mojej ocenie całościowa wartość naukowa prac [A1-A9] w postaci zgromadzonego materiału doświadczalnego oraz wyników przeprowadzonych analiz nie podlega dyskusji. W większości jest to materiał doświadczalny nowy, obejmujący nieobserwowane dotychczas wzbudzone stany elektronowe cząsteczki KCs lub znacznie rozszerzający obszar poznania w stanach już obserwowanych.

Z recenzorskiego obowiązku wymienię najważniejsze osiągnięcia przedstawione w wybranych artykułach cyklu [A1-A9]:

- w pracy [A1] nad stanem 4¹Σ⁺ zaobserwowano poziomy oscylacyjne 70 < v' ≤ 91 leżące blisko granicy dysocjacji stanu (27 cm⁻¹ poniżej), weryfikując tym samym negatywnie przewidywania teoretyczne dotyczące potencjalnego występowania lokalnych zaburzeń stanu 4¹Σ⁺ ze strony stanów sąsiadujących;
- praca [A2] obejmowała spektroskopię stanów wzbudzonych leżących w rejonie 17 500 cm⁻¹ – 18 600 cm⁻¹ powyżej $v = 0$ stanu podstawowego X¹Σ⁺, doświadczalnie zaobserwowano silne oddziaływanie spin - orbita dla obszaru powyżej 18 200 cm⁻¹ powodujące mieszanie się funkcji falowych stanu singletowego 3¹Π i bliskich stanów trypletowych - co potencjalnie może być wykorzystane w procesie optycznego transferu ultrazimnych cząsteczek KCs do absolutnego oscylacyjno-rotacyjnego stanu podstawowego;
- praca [A3] wykazała obecność istotnych nieregularności w stanie 4¹Π zinterpretowanych przez autorów jako wynik przesunięcia poziomów $v = 0,1,11,12$ na skutek oddziaływania z poziomami energetycznymi sąsiadujących stanów, kształt wykreślonej doświadczalnej

- krzywej potencjalnej stanu $4^1\Pi$ potwierdza obliczenia *ab initio* wykonane w przypadku sprzężenia Hunda (a);
- w pracy [A5] zaprezentowano wyniki analizy deperturbacyjnej stanu $6^1\Sigma^+$ (obserwowanego po raz pierwszy w pracy [A4]) a zaburzanego przez stan $4^3\Pi$, uwzględniono oddziaływanie spin - orbita pomiędzy stanami, uzyskano dopasowanie doświadczalnych krzywych potencjalnych (IPA) obu stanów ze średnim odchyleniem standardowym nie przekraczającym 0.1 cm^{-1} ;
 - stany $C(3)^1\Sigma^+$ oraz $c(2)^3\Sigma^+$ zostały zarejestrowane i zanalizowane w pracach [A7, A8], przy czym obserwacja słabych linii przejścia $C\leftarrow X$ wymagała zmiany parametrów eksperymentalnych poprzez kontrolę natężenia światła wiązki pompującej oraz odpowiedni dobór znakowanych poziomów oscylacyjno-rotacyjnych w stanie podstawowym, dla obu stanów wyznaczono doświadczalne krzywe potencjalne;
 - w pracy [A9] zarejestrowano widma przejść do stanów $2^3\Pi$, $3^3\Sigma^+$ oraz $D(2)^1\Pi$, przeprowadzono po raz pierwszy analizę deperturbacyjną dla stanu $D(2)^1\Pi$ z uwzględnieniem oddziaływania spin-orbita ze stanem $2^3\Pi_1$, otrzymano w pełni analityczny model opisujący ze średnim odchyleniem standardowym 0.03 cm^{-1} energie ponad 2000 poziomów oscylacyjno-rotacyjnych w układzie obu oddziałujących stanów.

Artykuły [A1-A9] składające się na opiniowane pierwsze osiągnięcie naukowe dra Jacka Szczepkowskiego oraz zaprezentowane w nich rezultaty oceniam bardzo wysoko. Stanowią one niezaprzeczalny dowód realizacji celów badawczych podjętych przez Habilitanta.

Ocena osiągnięcia 2

Dwie kolejne współautorskie prace [B1, B2], wykonane w mocno międzynarodowych zespołach, stanowią podstawę osiągnięcia nr 2 zatytułowanego „Struktura energetyczna dimerów bipolarnych zawierających atom strontu”.

Praca [B1] przynosi wyniki pierwszych spektroskopowych badań cząsteczki KSr w postaci obserwacji widma termoluminescencji uzyskanego w wielostrefowym piecu typu heat-pipe. Celowa modyfikacja pieca została przeprowadzona przez samego Habilitanta i rozwiązała potencjalne problemy z uzyskiwaniem fazy ciekłej alkaliów znacznie różniących się temperaturami topnienia/wrzenia. Widma przejścia $B(2)^2\Sigma^+\rightarrow X(1)^2\Sigma^+$ zostały zarejestrowane w rejonie spektralnym $8850\text{ cm}^{-1} - 9300\text{ cm}^{-1}$ z rozdzielczością 0.16 cm^{-1} . Relatywnie niska rozdzielczość, wynikająca zapewne z parametrów technicznych pozostającego w dyspozycji Habilitanta spektrometru Bruker Vertex v80 nie pozwoliła na pełną obserwację struktury rotacyjnej pasm. Nie rzutowało to jednak na wartość i jakość uzyskanych rezultatów. Zastosowana przez autorów oryginalna metoda analizy danych doświadczalnych wspomagana teoretycznym modelowaniem położenia linii rotacyjnych w głowicach pasm zaowocowała zestawem doświadczalnych parametrów Dunhama dla stanów $B\leftarrow X$, zaś w następnym kroku kształtami doświadczalnych krzywych potencjalnych wyznaczonych metodą IPA. Jak się wydaje pomimo pewnych ograniczeń zastosowanej metody doświadczalnej autorzy, w tym Habilitant, uzyskali cenne rezultaty doświadczalne i zaproponowali narzędzie do szybkiej optymalizacji kształtu teoretycznych krzywych potencjalnych - narzędzie użyteczne np. w doświadczenia z wytwarzaniem ultrazimnych molekuł.

W pracy [B2] zaprezentowano rezultaty, koordynowanej przez Habilitanta, współpracy dwóch grup eksperymentalnych połączonych z wynikami teoretycznymi. Prace doświadczalne z wykorzystaniem dwukolorowej spektroskopii fotoasocjacyjnej ultrazimnej ($T\sim 1\mu K$) mieszaniny atomów rubidu i strontu przeprowadzono w *Van der Waals-Zeeman Institute, Institute of Physics, University of Amsterdam* (grupa prof. Schrecka), zaś pomiary w wysokiej temperaturze ($T\sim 1000K$) wykonano w IF PAN w Warszawie techniką laserowo wzbudzonej fluorescencji (LIF). Realizacja głównego celu pracy tj. wykreślenie doświadczalnej krzywej potencjalnej podstawowego stanu elektronowego $X(1)^1\Sigma^+$ cząsteczki RbSr, wymagała fitowania danych z obu eksperymentów, a w obszarze energii gdzie dane eksperymentalne nie były dostępne konieczne było posiłkowanie się wynikami obliczeń *ab initio* uzyskanymi trzema metodami. Źródła danych pokrywające stan $X(1)^1\Sigma^+$ zostały graficznie

przedstawione w Autoreferacie na Rys. 8. Semiempiryczna krzywa energii potencjalnej stanu X przyniosła pierwsze szacowane wartości głębokości stanu podstawowego dla dimerów metal alkaliczny-stront (Table 8 [B2]).

Należy zaznaczyć, że w obu pracach [B1, B2] przedstawiono wręcz podręcznikowe wykorzystanie rezultatów obliczeń *ab initio*, które istotnie wspomagały dane doświadczalne uzyskane przez Habilitanta w obszarach, gdzie dane eksperymentalne nie były dostępne lub nie przynosiły oczekiwanych rezultatów.

Ocena aktywności naukowej

Dorobek naukowy dra Jacka Szczepkowskiego obejmuje łącznie 43 artykułów (10 przed uzyskaniem doktoratu) opublikowanych w recenzowanych czasopismach klasyfikowanych przez *Journal Citation Reports* (JCR). Poza wymienionymi wcześniej są to m. in. *The Journal of Chemical Physics*, *RSC Advances*, *Physical Review A*, *Physical Review B*, *The European Physical Journal ST*, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, *Optica Applicata* oraz *Acta Physica Polonica A*.

Wyniki prowadzonych badań zostały również zaprezentowane przez Habilitanta w formie wystąpień na 3 krajowych i 1 międzynarodowej konferencji tematycznych – w ostatnim przypadku było to renomowane *Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy* (Dijon, 2019).

Dr Jacek Szczepkowski legitymuje się również udziałem w realizacji 8 krajowych i międzynarodowych projektów badawczych związanych z fizyką zimnych molekuł. W 3 spośród nich pełnił funkcję kierownika (2017/01/X/ST2/00057) lub koordynatora części projektu realizowanej w IF PAN (2021/43/B/ST4/03326 – w trakcie realizacji, PHC Polonium).

Habilitant jest również współautorem zgłoszenia patentowego nr P.442834 z dnia 15.11.2022 pt. „Optyczny filtr krawędziowy górnoprzepustowy oraz sposób wykonania takiego filtra” dotyczącego wykorzystania filtra optycznego opartego na powłoce $\text{ZnO:Al}_2\text{O}_3$. Prototyp filtra jest obecnie stosowany w IF PAN w badaniach spektroskopowych NaSr z wykorzystaniem spektrometru fourierowskiego.

Wśród pozostałych osiągnięć uzupełniających aktywną działalność naukową Habilitanta wymienię m. in.: uczestnictwo w projekcie Popularyzacja Kwantowej Kryptografii (SONP/SP/513438/2021) w ramach programu Ministerstwa Edukacji i Nauki Społeczna odpowiedzialność nauki – Popularyzacja nauki i promocja sportu oraz recenzowanie 3 artykułów naukowych w *Journal of Molecular Structure* (2) oraz *International Journal of Quantum Chemistry* (1).

W działalności naukowej Habilitanta należy wskazać zrealizowane 3 pobyty stażowe, w tym:

- jeden krajowy 2005-2013 (pobyty cykliczne) Krajowe Laboratorium Fizyki Atomowej Molekularnej i Optycznej, Toruń;
- dwa realizowane w zagranicznych ośrodkach badawczych: 09.2002-01.2004 (przed doktoratem) - Institut für Experimentalphysik, TU Graz (Austria) oraz 11.2011-01.2012 Institut für Quantenoptik und Quanteninformation, ÖAW Innsbruck (Austria).

Ich rezultatem stało się 8 opublikowanych artykułów (punkt V.1. Autoreferatu) oraz praca [B2] z roku 2018 przedstawiona przez Habilitanta jako istotna część osiągnięcia naukowego nr 2. Należy to uznać za wynik bardzo dobry, biorąc pod uwagę łączny czas trwania staży oraz to, że nie były to jedyne publikacje wydawane przez Habilitanta w tamtych okresach. Ponadto czas wydania pracy [B2] wskazuje na kontynuowaną obecnie (i mam nadzieję planowaną w przyszłości) współpracę Habilitanta z grupą prof. Schrecka (IQO, ÖAW Innsbruck). Dowodzi to pozytywnego wpływu odbytego stażu na uzyskanie osiągnięcia naukowego będącego przedmiotem obecnego postępowania awansowego.

Konkluzja

Biorąc pod uwagę ustawowe wymagania stawiane osiągnięciom naukowym osób ubiegających się o stopień doktora habilitowanego, określone w art. 219 ust. 1 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2018 r. poz. 1668) **jednoznacznie pozytywnie opiniuję przedstawiony przez dra Jacka Szczepkowskiego dorobek naukowy tj. dwa cykle powiązanych tematycznie artykułów naukowych oraz stwierdzam, że stanowi on znaczący wkład w rozwój dyscypliny nauki fizyczne.**

Wobec powyższego rekomenduję Radzie Naukowej Instytutu Fizyki PAN **nadanie doktorowi Jackowi Szczepkowskiemu stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki fizyczne.**

Wojciech Gajda