

prof. dr hab. Roman Ciuryło
Instytut Fizyki
Uniwersytet Mikołaja Kopernika
w Toruniu

Ocena osiągnięć naukowych dra Jacka Szczepkowskiego

Dr Jacek Szczepkowski ubiegając się o stopień doktora habilitowanego przedstawił osiągnięcia naukowej ujęte w powiązanym tematycznie cyklu artykułów zatytułowanym „Struktura elektronowa cząsteczki KCs”. Cykl obejmuje 9 artykułów opublikowane w latach 2012 - 2022, w renomowanych czasopismach: Journal of Molecular Spectroscopy – 1 praca, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer – 4 prace, Chemical Physics Letters – 3 prace, Spectrochimica Acta Part A – 1 praca. We wszystkich pracach jest pierwszym współautorem, a w jednej z opublikowanych w Chemical Physics Letters jest jedynym autorem. Nie ma tu żadnych wątpliwości, że w tych pracach był autorem wiodącym gdyż „formułował problem badawczy”, „opracował koncepcje przeprowadzenia badań”, „wykonywał lub współwykonywał pomiary”, „identyfikował linie widmowe”, „wyznaczał krzywe potencjalne”, „koordynował prace zespołu”, a gdy było to potrzebne „optymalizował działanie komórki spektroskopowej typu heat-pipe”, „przebudowywał układy laserowe”, „napisał oprogramowania do deperturbacji dwukanałowej”. Oświadczenia dr. Jacka Szczepkowskiego dotyczące jego wkładu w powstanie prac cyklu są spójne z oświadczeniami pozostałych współautorów. Również powiązanie tematyczne prac cyklu nie budzi żadnych wątpliwości. Wszystkie prace poświęcone są analizie oddziaływań w układzie KCs.

Praca [A1] poświęcona jest wyznaczeniu krzywej potencjalnej opisującej stan $(4)^1\Sigma^+$ o asymptocie atomowej $K(4^2S)+Cs(5^2D)$. W tym celu wyznaczone zostały stany oscylacyjno-rotacyjne $v'=44-91$ oraz $J'=25-100$ (około) rozszerzając znacznie zakres v' w porównaniu z wcześniejszymi badaniami [L. Busevica et al., J. Chem. Phys. 134, 104307 (2011).] gdzie $v'=2-74$ oraz $J'=1-188$ (koło). Wyznaczenie wysokich stanów oscylacyjnych ułatwiło analityczne przedłużenie potencjału poza zakres badanych odległości między atomowych od 3.61 Å do 15.1 Å wykorzystując wyraz: $C_6/R^6 + C_8/R^8 + C_{10}/R^{10}$. Stałe C_6 i C_8 zostały ustalone na wartości otrzymane z obliczeń *ab initio* [B. Bussery et al., Chem. Phys. 116, 319 (1987).]. Co ciekawe nie zaobserwowano istotnych perturbacji przez inne stany. Dokładność otrzymanego modelu jest na poziomie 0.02 cm⁻¹. Oczywiście nie dotyczy to ostatnich stanów przy granicy dysocjacji ale i tak jest to bardzo dobra dokładność.

Praca [A2] poświęcona jest analizie oddziaływań również innych stanach korelujących do asymptoty atomowej $K(4^2S)+Cs(5^2D)$. Analiza obejmowała stany: $(4)^1\Sigma^+$, $(1)^3\Delta$, $(3)^1\Pi$, $(3)^3\Pi$, $(4)^3\Sigma^+$.



Ostatnie cztery krzywe przecinają się niemal w jednym punkcie na odległości około 7 Å. W ich przypadku ujawniają się wzajemne sprzężenie i perturbacje, które z pieczołowitością zostały przeanalizowane również w kontekście obliczeń *ab initio*. Przechodząc od sprzężenia Hunda a do c widać silne sprzężenia pomiędzy poszczególnymi stanami z $\Omega = 1$. Pełne zrozumienie tych oddziaływań wymagało wielokanałowych obliczeń stanów kwantowych a dane doświadczalne zostały otrzymane techniką znakowania poziomów.

Praca [A3] poświęcona jest analizie pasma z zakresu 21 000 cm^{-1} do 23 000 cm^{-1} w cząsteczce KCs, które zostało zidentyfikowane jako pasmo między stanami: podstawowym $X^1\Sigma^+$ i wzbudzonym $(4)^1\Pi$. Jaka można się było domyślać ten stan wzbudzony jest silnie sprzężony z innymi stanami. Wyniki przeanalizowano porównano z krzywymi obliczonymi teoretycznie przybliżenie Hunda a [M. Koreket et al., Can. J. Phys. 78, 977 (2000).] oraz c [M.Korek et al., J. Chem. Phys. 124, 094309 (2006).].

Praca [A4] poświęcona jest analizie tzw. stanu „szelfowego” $(6)^1\Sigma^+$. Wyznaczono około 1000 poziomów oscylacyjno-rotacyjnych w tym stanie, z który większość była silnie zaburzona przez pobliskie poziomy należące do stanu $(4)^1\Pi$. Podejście perturbacyjne została zastosowane w celu odtworzenia nieregularnego kształtu krzywej energii potencjalnej w stanie $(6)^1\Sigma^+$. Również i w tym przypadku z powodzeniem porównano otrzymane wyniki z obliczeniami teoretycznymi w przybliżeniu Hunda a [M. Koreket et al., Can. J. Phys. 78, 977 (2000).] oraz c [M.Korek et al., J. Chem. Phys. 124, 094309 (2006).].

Praca [A5] poświęcona jest analizie 1655 poziomów oscylacyjno-rotacyjnych z uwzględnieniem wzajemnych perturbacji między stanami $(6)^1\Sigma^+$ i $(4)^1\Pi$ spowodowanymi sprzężeniem spin-orbita. Oba stany mają asymptotę atomową $K(3^2D)+Cs(6^2S)$. Przeprowadzono wielokanałową deperturbację wspartą obliczeniami *ab initio*. Po przesunięciu krzywych teoretycznych o 65 cm^{-1} w górę uzyskano świetną zgodność z wyznaczonymi krzywymi potencjalnymi wyznaczonymi na podstawie danych doświadczalnych.

Praca [A6], której dr Jacek Szczepkowski jest jedynym autorem poświęcona jest analizie stanu $(5)^1\Pi$ o asymptocie odpowiadającej stanom atomowym $K(4^2S)+Cs(7^2P)$. W tym celu wykorzystano 1146 poziomów oscylacyjno-rotacyjnych oraz podejście perturbacyjne. Habilitant po raz pierwszy na świecie otrzymał dane doświadczalne dla tego stanu. Co ważne jest to również najwyższy stan $^1\Pi$, dla którego wykonane zostały obliczenia *ab initio*. Porównanie krzywych otrzymanych na podstawie danych doświadczalnych daje „dość” dobrą zgodność z obliczeniami teoretycznymi w przybliżeniu Hunda a [M. Koreket et al., Can. J. Phys. 78, 977 (2000).] oraz c [M.Korek et al., J. Chem. Phys. 124, 094309 (2006).]. Może to nieco zaskakiwać gdyż zaatakowany problem był na skraju możliwości tamtych obliczeń. Oczywiście określenie „dość” dobra zgodność jest obciążona wszelkimi zastrzeżeniami, które habilitant szczegółowo wypunktował i uznał ją za niedostateczną.

Praca [A7], [A8] i [A9] poświęcone są badaniom stanów skorelowanych z dwiema pierwszymi wzbudzonymi asymptotami atomowymi $K(4^2S)+Cs(6^2P)$ i $K(4^2P)+Cs(6^2S)$. Praca [A7] poświęcona jest analizie stanów $C(3)^1\Sigma^+$ i $c(2)^3\Sigma^+$, które korelują do asymptoty atomowej

$K(4^2S)+Cs(6^2P)$. W tym drugim przypadku wpływ mają perturbacje pochodzące od innych stanów poprzez sprzężenie ze stanem $b(1)^3\Pi$. Praca [A8] poświęcona jest analizie stanu $C(3)^1\Sigma^+$ rozszerzając poprzednie analizy o ponad 40 stanów oscylacyjnych. Pełną analizę przeprowadzono uwzględniając ponad 1300 poziomów oscylacyjno-rotacyjnych. Porówna otrzymane dane spektroskopowe z przewidywaniami teoretycznymi [M. Koreket et al., Can. J. Phys. 78, 977 (2000); J. T. Kim et al., J. Mol. Spectrosc. 256, 57 (2009); O.Dulieu, private communication.]. Praca [A9] poświęcona jest pierwszemu podejściu do analizy silnie sprzężonych stanów $D(2)^1\Pi$, $(2)^3\Pi$ i $(2)^3\Sigma^+$, korelujących do atomowej asymptoty $K(4^2P)+Cs(6^2S)$. Opracowano dwukanałowy model opisu stanów $D(2)^1\Pi$ i $(2)^3\Pi$. Koncentrując się na nisko położonych poziomach w stanie $D(2)^1\Pi$ to podejście umożliwiło odtworzenie ponad 2000 poziomów oscylacyjno-rotacyjnych z dokładnością lepszą niż 0.03 cm^{-1} .

Opisanie oddziaływań wybranej cząsteczki dwuatomowej w szerokim zakresie stanów wzbudzonych jest ogromnym wyzwaniem zarówno pod względem doświadczalnym jak i teoretycznym. Pokazuje to nawet pobieżne przedstawienie prac cyklu przedłożonego przez habilitanta. Mimo, że technikom doświadczalnym nie poświęciłem miejsca to są one kluczowe dla wszystkich prac cyklu. Wymagały one od habilitanta posługiwania się różnymi systemami laserowymi i pracy w różnych zakresach widmowych. W niektórych wypadkach uruchamianie systemu było raczej budowaniem niemal od podstaw lasera, co prawda z już gotowych elementów. Kluczowa dla tych prac była metrologia częstości i to nie w skali kilku linii ale masowej wielu tysięcy przejść oscylacyjno-rotacyjnych. Jednak samo zbudowanie układu pomiarowego, zebranie danych i wyznaczenie częstość obserwowanych przejść, to za mało. Konieczna była złożona analiza, często wielokanałowej struktury stanów oscylacyjno-rotacyjnych. To wręcz benedyktyńska praca. Habilitant miał szczęście współpracować z wybitnymi autorytetami w tej dziedzinie profesorami Włodzimierzem Jastrzębski i Pawłem Kowalczykiem. Świetnie skorzystał z tego wsparcia. W żadnej mierze nie umniejsza to jego samodzielności.

Przedstawione prace cyklu dają kompleksowy opis wzbudzonych stanów cząsteczki KCs. Na chwilę obecną jest on najpełniejszy. Oczywiście wiele jest jeszcze kwestii otwartych to do znaczących osiągnięć dr Jacka Szczepkowskiego należy zaliczyć szereg już rozwiązanych problemów: doświadczalne zbadanie stanu $(5)^1\Pi$ – najwyżej wzbudzonego stanu $^1\Pi$ cząsteczki KCs badanego doświadczalnie i porównanie z przewidywaniami teoretycznymi [A6]; kompleksową analizę stanów $(4)^1\Sigma^+$, $(1)^3\Delta$, $(3)^1\Pi$, $(3)^3\Pi$, $(4)^3\Sigma^+$ cząsteczki KCs, w której wykorzystano wielokanałowe obliczenia stanów kwantowych a dane doświadczalne zostały otrzymane techniką laserowego znakowania poziomów [A1,A2]; analiza tzw. stanu „szelfowego” $(6)^1\Sigma^+$ cząsteczki KCs, opisywanego potencjałem o nieregularnym kształcie [A4,A5]; dwukanałowy model opisujący nisko położonych poziomy w stanie $D(2)^1\Pi$ sprzężonym z $(2)^3\Pi$ z dokładnością lepszą niż 0.03 cm^{-1} [A9]. Wyniki te stanowią znaczny wkład w poznanie oddziaływań międzyatomowych. Prace tego typu mają kluczowe znaczenie dla: opisu fotoasocjacji ultrazimnych atomów, wykorzystania techniki STIRAP w ultrazimnych gazach, tworzenia ultrazimnych cząsteczek polarnych, optycznych manipulacjach gazami zdegenerowanymi.

W mej ocenie osiągnięcia naukowa przedstawione w ramach cyklu pt. „Struktura elektronowa cząsteczki KCs” powiązanych tematycznie artykułów spełniają wymogi stawiane przez

Ustawę z dnia 20 lipca 2018 r. „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce” z późniejszymi zmianami (art. 219 ust. 1. pkt 2) w postępowaniu w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego.

Wysoko oceniam również pozostały dorobek publikacyjny habilitanta obejmujący 8 prac przed uzyskaniem stopnia doktora (pominąłem tu pozycje [P41] oraz [P43] według wykazu osiągnięć, mimo, że tytuł tej ostatniej brzmi intrygująco) oraz 25 prac opublikowanych po doktoracie ale nie wchodzących w skład opisanego na wstępie cyklu (uwzględniłem tu pracę [J. Szczepkowski, W. Jastrzebski, A. Grochola, P. Kowalczyk, On the $1^1\Sigma_u^+$ electronic state in the strontium dimer, J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer 310, 108742 (2023).] nie wymienioną w wykazie osiągnięć). Razem z 9 pracami cyklu habilitant jest autorem lub współautorem 42 prac oraz 1 wniosku patentowego. Warto podkreślić, że wśród wymienionych 24 prac jest 5, w których jest pierwszym autorem. Tematycznie pokrywają szeroki wachlarz układów dwuatomowych: KSr, RbSr, Sr₂, Rb₂, KLi, LiCs, NaLi, NaCs. Z mojej perspektywy szczególnie interesujące wydają się prace [P9, P10], w których badane jest oddziaływanie atomów strontu z atomami alkalicznymi (KSr, RbSr). Atomy strontu posiadają silnie wzbronione przejścia zegarowe umożliwiające badania spektroskopowe o niezwyklej dokładności wykorzystywane w poszukiwaniu nowych oddziaływań czy ciemnej materii. Jednak zderzenia atomów strontu nie mogą być kontrolowane przy pomocy magnetycznych rezonansów Feshbacha (jest to możliwe jedynie przy pomocy optycznych rezonansów Feshbacha) a to z powodu dość ubogiej struktury momentu pędu tego układu. Sytuacja zmienia się diametralnie gdy atomy strontu zderzają z atomami alkalicznymi. Możliwość efektywnego stosowania magnetycznych i optycznych rezonansów Feshbach oraz występujące przejścia zegarowe czynią te układy bardzo interesującymi i perspektywicznymi z punktu widzenia badań fundamentalnych. Oczywiście kluczowe dla tego typu prac jest poznanie struktury molekularnej układów stron-atomy alkaliczne. Tego zadania podjął się habilitant, co śledzę z wielkim zainteresowaniem.

Doświadczenie dr. Jacka Szczepkowskiego nie ogranicza się tylko do spektroskopii par metali generowanych termicznie. Pracując na doktoratem zaangażował się w badania ultra zimnych zderzeń atomów litu i sodu oraz otrzymanie pierwszego w Polsce kondensatu Bosego-Einsteina. Konsekwencją tych badań już po uzyskaniu stopnia doktora były prace nad otrzymaniem kondensatów spinorowych atomów rubidu. Aktywność naukową poza swoim obecnym miejscem pracy Instytutem Fizyki PAN prowadził również w szeregu innych ośrodków naukowych: Institut für Experimentalphysik TU Graz (IEP) – grupa prof. L. Windholza, Krajowe Laboratorium FAMO w Toruniu – grupa prof. W. Gawlika, Institut für Quantenoptik und Quanteninformation (IQQI) ÖAW Innsbruck – grupa prof. F. Shrecka. Działalność ta zaowocowała publikacjami zarówno przed [P34, P35, P37-P40] jak i po uzyskaniu stopnia doktora [P25, P26, P33]. Szczególną uwagę zwróciłbym tutaj na pracę [P25], która jest już cytowana w ponad stu innych publikacjach. Raportuje otrzymanie podwójnego kondensatu Bosego-Einsteina z atomami ⁸⁷Rb i atomami ⁸⁸Sr lub ⁸⁴Sr. Jest ona opublikowana w doborowym towarzystwie z Simonem Stellmerem, Florianem Schreckiem oraz Rudolfem Grimmem. Również inne prace powstały we współpracy międzynarodowej wspomnę jedynie [P2, P9, P10, P14, P18, P24]. Tu z kolei wyróżniłbym pracę [P10], która również jest poświęcona układowi RbSr. Tym razem na podstawie dwukolorowej fotoasocjacji ultrazimnych atomów zostały wyznaczone stany

związane cząsteczki w elektronowym stanie podstawowym blisko granicy dysocjacji. Informacje dotyczące głębiej położonych stanów zaczerpnięto z widm otrzymanych techniką laserowo indukowanej fluorescencji w temperaturze 1000 K używając komórki absorpcyjnej typu „heat-pipe”. Te dane pozwoliły otrzymać skalowalny masą model oddziaływania Rb-Sr, umożliwiający obliczenie długości rozpraszania jak i magnetycznych rezonansów Feshbacha. Jest to piękny przykład bardzo kompleksowych badań na najwyższym światowym poziomie, wymagających stosowania różnorodnych technik doświadczalnych i teoretycznych. Habilitant jest jednym z autorów korespondencyjnych, a praca zgodnie z bazą Web of Science już zyskała 24 cytowania. Należy tu nadmienić, iż habilitant kierował projektem MNiSW PHC Polonium wspomagającym współpracę międzynarodową. Pokazuje to, że dr Jacek Szczepkowski wykazał się istotną aktywnością naukową nie tylko w Instytucie Fizyki PAN ale również w innych ośrodkach badawczych.

Dr. Jacek Szczepkowski jest bardzo doświadczonym badaczem zdolnym samodzielnie stawiać czoła złożonym wyzwaniom doświadczalnym, o czym świadczy bogactwo zagadnień przez niego badanych i udokumentowanych 42 publikacjami w renomowanych czasopismach oraz udział w realizacji wielu projektów badawczych. Te osiągnięcia były możliwe dzięki jego świetnemu warsztatowi doświadczalnemu oraz umiejętnościom komputerowym, z których w pełni korzystał. Należy podkreślić, że jego prace są chętnie cytowane i przykuwają uwagę gdy są referowane na konferencjach. Zgodnie z bazą Web of Science jego prace były cytowane 366 razy przez innych autorów, a indeks H wynosi 11. Był też recenzentem artykułów złożonych do czasopism o zasięgu między narodowym. Dziwić może jedynie dlaczego ten wniosek habilitacyjny został przedłożony dopiero teraz. Przeglądając się osiągnięciom habilitanta nie mam wątpliwości, że jego dorobek upoważniał go do wystąpienia z wnioskiem habilitacyjny już parę lat wcześniej.

Osiągnięcia naukowe dr. Jacka Szczepkowskiego z całą pewnością stanowią znaczący wkład w poznanie oddziaływań międzyatomowych szczególnie ważnych w badaniach ultrazimnych wielokomponentowych gazów zdegenerowanych. Podsumowując stwierdzam, iż przedstawione osiągnięcia oraz pozostały dorobek naukowy w pełni spełniają ustawowe oraz zwyczajowe wymagania stawiane w postępowaniach habilitacyjnych. Tym samym wnoszę o przystąpienie do dalszych kroków postępowania i nadanie doktorowi Jackowi Szczepkowskiemu stopnia doktora habilitowanego.

