



Dr hab. Rafał Hakalla, prof. UR

Rzeszów, dnia 29.02.2024

**Recenzja dorobku naukowego dr. Jacka Szczepkowskiego
w związku z postępowaniem o nadanie stopnia doktora habilitowanego**

1. Stopień naukowy doktora

Pan dr Jacek Szczepkowski uzyskał stopień doktora nauk fizycznych (z wyróżnieniem) na Wydziale Fizyki i Astronomii Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu w roku 2009 broniąc rozprawę pt. „*The cold collisions of lithium isotopes and sodium atoms in the magneto-optical trap*”. Promotorami dysertacji byli prof. Laurentius Windholz (Uniwersytet Techniczny, Graz, Austria) oraz dr hab. Ewa Paul-Kwiek (Akademia Pomorska, Słupsk).

2. Ocena osiągnięć naukowych

Jako podstawę swojego wniosku o nadanie stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne, pan dr Jacek Szczepkowski przedstawił dwa jednotematyczne osiągnięcia.

Pierwsze z osiągnięć (główne) to zestaw 9 publikacji [A1-A9], w tym 8 współautorskich, pod wspólnym tytułem „*Struktura elektronowa cząsteczki KCs*”. We wszystkich publikacjach Habilitant jest pierwszym [A1-A5, A7-A9] lub jedynym [A6] autorem oraz zawsze autorem korespondencyjnym. Wszystkie prace opublikowano w renomowanych czasopismach z listy JCR o zasięgu globalnym: *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* (4), *Chemical Physics Letters* (3), *Spectrochimica Acta A* (1).

Drugie osiągnięcie stanowią 2 publikacje współautorskie [B1-B2] ujęte jako jednotematyczny cykl zatytułowany „*Struktura energetyczna dimerów bipolarnych zawierających atom strontu*”. W obydwóch publikacjach Kandydat jest autorem korespondencyjnym, w jednej nich [B1] jego nazwisko wymienione jest na pierwszym miejscu, a w [B2] na miejscu drugim. Obydwie prace opublikowano w renomowanych czasopismach z listy JCR o zasięgu globalnym: *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* oraz *Physical Chemistry Chemical Physics*.

We wszystkich publikacjach [A1-A9, B1-B2], zgłoszonych jako osiągnięcia, pan dr Jacek Szczepkowski odegrał zdecydowanie wiodącą lub jedną z głównych ról, co jednoznacznie wynika z przedłożonej dokumentacji wraz z oświadczeniami wszystkich współautorów.

Przedstawione do oceny osiągnięcia naukowe stanowią wyniki badań struktury energetycznej przedstawicieli dwóch grup cząsteczek polarnych będących w kręgu bezpośredniego zainteresowania badaczy pracujących nad otrzymaniem ich w warunkach ultraniskich temperatur. Pierwszą grupę stanowi heterojądrowy dimer metalu alkalicznego KCs [A1-A9], drugą dimery zbudowane z atomów metalu alkalicznego i strontu KSr i RbSr [B1-B2]. Każde z tych osiągnięć omówię oddzielnie.

2.1. Osiągnięcie główne - cykl publikacji [A1-A9]

Osiągnięcie główne [A1-A9] poświęcone jest rezultatom kompleksowych badań struktury energetycznej cząsteczki KCs, przeprowadzonych przy użyciu metody spektroskopii polaryzacyjnej laserowego znakowania poziomów (PLS) w warunkach wysokiej rozdzielczości. W rezultacie dr Jacek Szczepkowski uzyskał informacje o strukturze oscylacyjno-rotacyjnej jedenastu stanów elektronowych molekuly KCs. Na ich podstawie wyznaczył, w większości po raz pierwszy, krzywe energii potencjalnej dla stanów: $E(4)^1\Sigma^+$ [A1]; $(3)^1\Pi$, $(3)^3\Pi$, $(4)^3\Sigma^+$ [A2]; $(4)^1\Pi$ [A3]; $(6)^1\Sigma^+$ [A4, A5]; $(4)^3\Pi$ [A5]; $(5)^1\Pi$, $c(2)^3\Sigma^+$ [A6]; $C(3)^1\Sigma^+$ [A6, A8] oraz $D(2)^1\Pi$, $(2)^3\Pi$, $(2)^3\Sigma^+$ [A9]. Dodatkowo, w pracach [A5] oraz [A9] Habilitant przeprowadził zaawansowaną, wielokanałową analizę deperturbacyjną, co umożliwiło mu opisanie zaobserwowanych skutków oddziaływań pomiędzy sąsiadującymi stanami singletowymi i trypletowymi.

Przeprowadzone przez Habilitanta badania cząsteczki KCs, poza dokładną, w większości przypadków pierwszą, charakterystyką szeregu wzbudzonych stanów elektronowych, pozwoliły także na sformułowanie kilku nieznanych dotąd uogólnień na temat właściwości tej molekuly:

a) Szereg zaobserwowanych linii widmowych odpowiadających wzbronionym przejściom interkombinacyjnym pomiędzy poziomami rowibronowymi singletowego stanu podstawowego, a poziomami wzbudzonych stanów o multipletowości trypletowej jest spowodowanych przez oddziaływanie spin-orbita, które przyczynia się do zmieszania funkcji falowych tych stanów. Tego typu przejścia są bardzo pożądane w przypadku prób kontrolowania reakcji chemicznych na poziomie kwantowym w warunkach ultraniskich temperatur.

b) We wszystkich badanych przypadkach, oddziaływanie spin-orbita nie jest wystarczająco silne, aby spowodować pełne rozszczepienie grupy stanów elektronowych od przypadku (a) do (c) Hunda.

c) Możliwa jest obserwacja bezpośrednich przejść z podstawowego poziomu $X^1\Sigma^+(v''=0)$ do poziomów elektronowo-oscylacyjno-rotacyjnych położonych w bezpośrednim sąsiedztwie granicy dysocjacji stanów wzbudzonych związanych z asymptotą atomową $K(4^2S)+Cs(5^2D)$. Warto zauważyć, iż przejścia tego typu są wykorzystywane do transferu słabo związanych cząsteczek, wytworzonych w wyniku procesu foto- lub magneto-asocjacji, na rowibroniczne poziomy stanu podstawowego.

Należy zwrócić uwagę, iż badania struktury energetycznej heterojądrowych dimerów metali alkalicznych takich jak KCs prowadzone są od wielu lat, głównie w grupie prof. S. Cornisha (Durham) oraz prof. H-C. Nägerla (Innsbruck). Niemniej do momentu podjęcia się tego tematu przez pana dr. Jacka Szczepkowskiego, nasza wiedza na ich temat pozostawała niezwykle uboga. Habilitant, swoimi badaniami, wykorzystującymi m.in. udoskonaloną aparaturę oraz zaawansowaną wielokanałową analizę deperturbacyjną, przyczynił się w znaczącym stopniu do wypełnienia luki informacyjnej o strukturze energetycznej wzbudzonych stanów elektronowych cząsteczki KCs.

2.2. Osiągnięcie nr 2 - cykl publikacji [B1-B2]

Osiągnięcie nr 2 [B1-B2] opisuje wyniki badań właściwości cząsteczek bipolarnych KSr i RbSr. Publikacja [B1] zawiera badania stanu podstawowego $X(1)^2\Sigma^+$ i stanu wzbudzonego $B(2)^2\Sigma^+$ w cząsteczce KSr w oparciu o analizę widma termicznie wzbudzonej fluorescencji pomiędzy tymi stanami oraz wyniki obliczeń *ab initio* wykonanych trzema różnymi metodami przez niezależne grupy teoretyków. Dzięki temu po raz pierwszy wyznaczono stałe molekularne stanów elektronowych KSr w oparciu o wyniki pomiarów spektroskopowych. W publikacji [B2] opisane są badania cząsteczki RbSr prowadzone w warunkach zarówno wysokich jak i ultraniskich temperatur. Eksperymenty wysokotemperaturowe wykonano w IF PAN (Warszawa) przy użyciu technik termicznie i laserowo wzbudzonej fluorescencji, zachodzącej pomiędzy stanami $B(2)^2\Sigma^+$ i $X(1)^2\Sigma^+$. Z kolei badania struktury energetycznej RbSr w ultraniskich temperaturach przeprowadzono metodami spektroskopii dwufotonowej i magnetoasocjacyjnej w grupie prof. Floriana Schrecka UA (Amsterdam). Globalna analiza wyników obu eksperymentów oraz rezultatów obliczeń *ab initio* pozwoliła Habilitantowi na wyznaczenie semiempirycznej krzywej energii potencjalnej stanu podstawowego oraz wyznaczenie współczynników dyspersji C_6 i C_8 .

Autorskie badania pana dr. Jacka Szczepkowskiego nad właściwościami cząsteczek bipolarnych K_{Sr} i Rb_{Sr} pozwoliły na sformułowanie następujących, bardzo istotnych konkluzji:

a) Cechą charakterystyczną dimerów zbudowanych z atomu metalu alkalicznego i strontu (K_{Sr} i Rb_{Sr}), ale także Li_{Sr} (dane literaturowe) oraz Na_{Sr} (wstępne wyniki badań spektroskopowych uzyskane przez Kandydata), jest niemal diagonalny rozkład wartości czynników Francka-Condon'a przejść pomiędzy poziomami oscylacyjnymi stanów $X(1)^2\Sigma^+$ i $B(2)^2\Sigma^+$. Cecha ta może zostać z powodzeniem wykorzystana do chłodzenia optycznego takich odmian dimerów.

b) Otrzymana krzywa energii potencjalnej stanu podstawowego molekuly Rb_{Sr} pozwoliła na pierwsze obliczenia położenia rezonansów Fano-Feshbacha, które są obecnie obiektem intensywnych badań w kierunku wytwarzania tej molekuly w stanie ultrazimnym (grupa prof. Floriana Schrecka).

c) Nowatorskie metody pomiarowe i analityczne dotyczące molekul K_{Sr} i Rb_{Sr} pozwalają na względnie szybką weryfikację oraz optymalizację wyników obliczeń *ab initio*. Sprawna ich weryfikacja jest niezwykle istotna dla prowadzonych doświadczeń, gdyż znacznie ułatwia i przyspiesza proces analizy danych.

2.3. Podsumowanie

Prace badawcze pana dr. Jacka Szczepkowskiego [A1-A9, B1-B2], przedstawione do niniejszej oceny jako osiągnięcia naukowe w celu uzyskania stopnia doktora habilitowanego, pozwoliły na całościowy opis struktury energetycznej stanów wzbudzonych molekuly KCs (ponad 13 000 zaobserwowanych przejść, ponad 9 000 zinterpretowanych poziomów oscylacyjno-rotacyjnych, wyznaczenie krzywych energii potencjalnej 10 wzbudzonych stanów elektronowych) oraz podstawowego i nisko wzbudzonych stanów elektronowych w dimerach K_{Sr} i Rb_{Sr} (38 nierozdzielonych rotacyjnie głowic pasm systemu $B(2)^2\Sigma^+ - X(1)^2\Sigma^+$). W przeprowadzonych przez Habilitanta badaniach koniecznym było wykorzystanie i udoskonalenie komplementarnych technik pomiarowych oraz zróżnicowanych metod analizy danych, przy czym zaawansowane metody *ab initio* wymagały nawiązania współpracy z wiodącymi w tej dziedzinie, międzynarodowymi zespołami oraz sprawne koordynowanie wspólnych projektów, którym to wyzwaniom Kandydat sprostał z niemałym sukcesem.

Oczywistym jest jednocześnie, iż pełne wyjaśnienie mechanizmu odpowiedzialnego za, obserwowane w pracach [A7] i [A8], bezpośrednie wzbudzenie ze stanu podstawowego $X^1\Sigma^+$ do stanu $c(2)^3\Sigma^+$ oraz przedstawionych w pracy m.in. [A8] zaburzeń położenia poziomów, wymaga przeprowadzenia globalnej analizy deperturbacyjnej z wykorzystaniem modelu uwzględniającego wszystkie oddziałujące stany skorelowane z pierwszą wzbudzoną asymptotą cezu, czego Habilitant jeszcze nie dokonał, a nad czym obecnie pracuje wraz z grupą prof. Asena Pashova z Uniwersytetu Sofijskiego, rozpoczynając dopiero prace nad konstrukcją takiego modelu.

Konkludując stwierdzam, że otrzymane przez pana dr. Jacka Szczepkowskiego wyniki są niezwykle istotne z punktu widzenia, intensywnie rozwijających się obecnie technik pomiarowych i metodologii z zakresu tzw. „zimnej fizyki”. Rezultaty otrzymane przez Habilitanta dostarczają nowych, unikatowych danych niezbędnych do planowania badań z udziałem ultrazimnych molekul. Posłużą one z pewnością także grupom teoretyków wykonujących obliczenia *ab initio*, ponieważ umożliwiają one szybką korektę i optymalizację stosowanych przez nich metod obliczeniowych.

3. Istotna aktywność naukowa realizowana w więcej niż jednej uczelni

Pan dr. Jacek Szczepkowski istotnie współpracował na rzecz zaprezentowanych do Oceny osiągnięć naukowych z uznanymi międzynarodowymi grupami badawczymi, zajmującymi się zarówno doświadczalną jak i teoretyczną spektroskopią molekularną. Są to m.in. Uniwersytet Warszawski (prof. Paweł Kowalczyk), UMK Toruń (prof. Piotr Żuchowski), Uniwersytet Paris-Saclay (prof. Olivier Dulieu), Uniwersytet Sofijski (prof. Asen Pashov), CNRS Paryż (prof. Romain Guérout), Uniwersytet Amsterdamski (prof. Florian Schreck), Akademia Wissenschaften (prof. Slava Tzanova) oraz Uniwersytet Techniczny w Gazu (prof. L. Windholz). Habilitant brał także bezpośredni, stacjonarny

udział w pracach niektórych z wymienionych powyżej zespołów podczas trzech długoterminowych staży naukowych:

a) 11.2011 - 01.2012 (3 miesiące) IQQI ÖAW Innsbruck, w grupie prof. F. Shrecka.

b) 2005 - 2013 Krajowe Laboratorium Fizyki Atomowej Molekularnej i Optycznej (KL FAMO) UMK Toruń w grupie prof. W. Gawlika (pobyt w ramach szeregu delegacji z jednostek macierzystych). Członek zespołu „MT BEC” badającego właściwości ultrazimnych gazów.

c) 09.2002 - 01.2004 (16 miesięcy) Institut für Experimentalphysik, TU Graz (IEP), w grupie prof. L. Windholza. Wykonawca w grantie FWF pt. *Ultra-Kalte Moleküle*.

Bezpośrednim wynikiem powyżej opisanej istotnej aktywności naukowej Habilitanta realizowanej w więcej niż jednej uczelni są przedstawione do Osiągnięć publikacje [A1-A9] oraz [B1-B2], a także spora liczba innych stanowiących tzw. „pozostałą aktywność naukową” Kandydata opisaną w następnym paragrafie.

4. Pozostała aktywność naukowa

Na całkowity dorobek publikacyjny dr. Jacka Szczepkowskiego składają się 43 prace. 41 z nich upowszechniono w renomowanych czasopismach o zasięgu globalnym, indeksowanych w wykazie JCR. W 17 z nich Kandydat jest pierwszym, a w jednej samodzielny autorem. 10 z wymienionych publikacji ukazało się przed uzyskaniem stopnia doktora, a pozostałe 33 po tym fakcie. 11 zostało przedstawionych jako omówione powyżej, osiągnięcia naukowe stanowiące podstawę postępowania habilitacyjnego Kandydata. Opublikowane wyniki swoich prac Habilitant zaprezentował w formie wykładów proorzonych bądź plenarnych na czterech międzynarodowych konferencjach naukowych, organizowanych zarówno w kraju (3) jak i za granicą (1).

Kandydat był zaangażowany w 10 projektów uzyskanych na drodze konkursów krajowych lub zagranicznych. W 3 z nich pełnił rolę kierownika. Jeden z nich jest obecnie w trakcie realizacji.

Pan dr Jacek Szczepkowski jest także współautorem zgłoszenia patentowego nr P.442834 pt. „*Optyczny filtr krawędziowy górnoprzepustowy oraz sposób wykonania takiego filtra*” z dnia 15.11.2022.

Habilitant został także doceniony poprzez ustanowienie go recenzentem trzech prac w międzynarodowych czasopismach z listy JCR: *Journal of Molecular Structure* oraz *International Journal of Quantum Chemistry*. Był także recenzentem polskich eliminacji Konkursu Prac Młodych Naukowców EU (EU Contest for Young Scientists – EUCYS, 2014).

Kandydat brał czynny udział w organizacji konferencji pn. „*International School & Conference on the Physics of Semiconductors*” w Jaszowcu, w edycjach 2021, 2022, oraz 2023.

5. Rekomendacja

Pozytywnie i bardzo wysoko oceniam przedstawione przez pana dr. Jacka Szczepkowskiego osiągnięcia naukowe stanowiące podstawę postępowania habilitacyjnego, a także istotną aktywność naukową realizowaną w więcej niż jednej instytucji naukowej, w szczególności zagranicznej. Uważam więc, iż **Habilitant spełnia wszystkie wymagania określone w art. 219 ust. 1. ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 30 sierpnia 2018 poz. 1668). W związku z powyższym rekomenduję nadanie panu doktorowi Jackowi Szczepkowskiemu stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki fizyczne.**

Przedstawione przez Kandydata osiągnięcia naukowe, które zostały udokumentowane licznymi pracami opublikowanymi w renomowanych czasopismach z listy JCR, uznaję za wybitne, o bardzo dużym wpływie na dyscyplinę i znaczeniu w skali międzynarodowej. Istotną aktywność naukową Habilitanta realizowaną w więcej niż jednej instytucji naukowej znajduję także na niespotykane wysokim poziomie. **Wnoszę zatem o wyróżnienie.**

Dr hab. Rafał Hakalla, prof. UR