

UNIwersYTET im. ADAMA MICKIEWICZA  
WYDZIAŁ CHEMII  
*ul. Umultowska 89b, 61-614 Poznań*

Prof. dr hab. Marek Kręglewski  
Zakład Chemii Teoretycznej

tel. 618291660, fax. 618191559  
e-mail: [mgreg@amu.edu.pl](mailto:mgreg@amu.edu.pl)

Poznań, 20.05.2016

Ocena dorobku naukowego i recenzja rozprawy habilitacyjnej pt.  
“Metody funkcji jawnie skorelowanych w obliczeniach efektów QED  
w układach atomowych i molekularnych”  
dra Mariusza Puchalskiego

**Uwagi ogólne**

Dr Mariusz Puchalski jest absolwentem dwóch wydziałów Uniwersytetu Warszawskiego. Studia magisterskie na Wydziale Matematyki, Informatyki i Mechaniki ukończył w 2001 roku, a na Wydziale Fizyki w 2003 roku. Następnie podjął studia doktoranckie na Wydziale Fizyki UW w zakresie fizyki teoretycznej. Jego promotorem był prof. dr hab. Krzysztof Pachucki, światowej klasy specjalista w zakresie elektrodynamiki kwantowej atomów i cząsteczek. Praca doktorska pt. “Efekty relatywistyczne i przesunięcie izotopowe w atomie litu” wymagająca dogłębnej znajomości mechaniki kwantowej i opanowania zaawansowanych metod matematycznych obroniona została w 2007 roku i oceniona jako wyróżniająca.

Już na tym etapie badań naukowych Kandydat wypracował metodologię, która pozwala porównywać najwyższej dokładności obliczenia kwantowe z dostępnymi danymi doświadczalnymi. Połączenie niezwykle zaawansowanych technik obliczeniowych, a zarazem ich weryfikacja przez porównanie z doświadczeniem, powoduje, że prace dra Mariusza Puchalskiego są publikowane w najlepszych czasopismach światowych i kreują standardy dla innych obliczeń, a często inspirują eksperymentatorów do wykonania nowych, dokładniejszych pomiarów. Pozwalają też zrozumieć wkład różnego typu oddziaływań na mierzone wielkości fizycznych.

Przebieg pracy zawodowej Kandydata wskazuje, że znaczące osiągnięcia naukowe są wynikiem przemyślanej, długofalowej strategii. Studia rozpoczął na Wydziale Matematyki, Informatyki i Mechaniki budując warsztat i poznając narzędzia, które z sukcesem wykorzystuje w badaniach w obszarze fizyki teoretycznej. Równolegle, już w czasie studiów



pracował jako programista/projektant w „Telbanku” doskonaląc swoje umiejętności w programowaniu. W czasie czteroletnich studiów doktoranckich osiągnął znaczące, oryginalne wyniki, które opublikował w najlepszych czasopismach, trzy prace w Phys.Rev.A i jedną w Phys.Rev.Lett, a swój wkład określa na 50 do 75%.

Po uzyskaniu stopnia doktora odbył 18-miesięczny staż podoktorski w University of Alberta w Kanadzie, a następnie został zatrudniony na stanowisku adiunkta naukowego w ramach grantu na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego. Od października 2010 roku pracuje jako adiunkt naukowo-dydaktyczny w Pracowni Chemii Kwantowej kierowanej przez prof. Jacka Komasę na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Odbył także kilka krótszych staży, od 1 do 4 miesięcy w Missouri University of Science and Technology i w University of Delaware. Od czasu studiów magisterskich współpracuje z prof. Krzysztofem Pachuckim, światowym specjalistą z zakresu elektrodynamiki kwantowej z Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego, z którym opublikował wiele wspólnych prac. Jednak w większości z tych prac wkład dr Mariusza Puchalskiego był dominujący.

Już we wstępie jednoznacznie stwierdzam, że rozprawa habilitacyjna dra Mariusza Puchalskiego jest wybitna, a Jego osiągnięcia znacząco wpływają na rozwój nauki światowej.

### **Ocena dorobku naukowego**

W dorobku naukowym dra Mariusza Puchalskiego nie ma prac nieistotnych. Już pierwsza praca z 2004 roku w Phys.Rev.A, jeszcze w czasie studiów doktoranckich, dotyczyła oryginalnej metody rekurencyjnej dla trójelektronowych całek Hylleraasa, co było rozwinięciem wcześniejszych koncepcji prof. Krzysztofa Pachuckiego. Zresztą w całym dorobku Kandydata widać wpływ warsztatu prof. Pachuckiego, promotora pracy doktorskiej. Także dwie kolejne prace dotyczyły tej samej rekurencyjnej metody. Jednak warsztat ten był przez dr Puchalskiego coraz bardziej samodzielnie rozwijany, a kolejne tematy badawcze były już jego autorstwa. W 2006 roku pozwoliło to na opublikowanie w Phys.Rev.Lett. pracy na temat różnic promieni ładunkowych wyznaczanych eksperymentalnie z przesunięcia izotopowego obserwowanego dla przejścia  $3S_{1/2} - 2S_{1/2}$  litu. Uważam zresztą tę pracę za dobrze charakteryzującą przyszłe osiągnięcia kandydata. Wysokiej jakości obliczenia kwantowe nie służą tylko temu, aby porównywać je z innymi obliczeniami, co w wielu wypadkach jest także znaczącym osiągnięciem, ale Kandydat podejmuje fundamentalne zagadnienia fizyki atomowej lub cząsteczkowej, aby w efekcie porównać wyniki obliczeń z najdokładniejszymi pomiarami eksperymentalnymi. Jest to droga, którą wskazał prof. Włodzimierz Kołos w swoich fundamentalnych pracach na temat cząsteczki wodoru





doprowadzając obliczenia do momentu bezpośredniego porównania z wynikami doświadczalnymi.

Wyjazd na staż podoktorski do University of Alberta do prof. Andrzeja Czarneckiego rozszerzył zainteresowania dr Mariusza Puchalskiego na układy quasi-cząsteczkowe zawierające pozytony, o czym napisze więcej omawiając prace przedstawione w cyklu stanowiącym rozprawę habilitacyjną.

Dorobek naukowy dr Mariusza Puchalskiego to przede wszystkim wszechstronne zastosowanie jawnie skorelowanych funkcji Hylleraasa dla układów trójciałowych, zawierających bądź 3 elektrony lub 2 elektrony i pozyton oraz uwzględnienie efektów relatywistycznych. Efektem tych obliczeń, poza cyklem habilitacyjnym, są wartości podstawowych własności fizykochemicznych dla atomu litu, kationu berylu, a także helu – układu dwuelektronowego.

Rozwinięcie technik obliczeniowych dla funkcji Hylleraasa z takimi sukcesami stosowanymi dla układów trójciałowych na układy czteroelektronowe okazuje się jeszcze problemem niezwykle skomplikowanym. Dlatego w dorobku Kandydata w ostatnich latach pojawiły się prace dla układów czterociałowych, takich jak atom berylu, jednak z wykorzystaniem jawnie skorelowanych funkcji Gaussa. Jest to także efekt bliskiej współpracy z prof. Jackiem Komasa, światowej klasy specjalistą od tego typu obliczeń.

Ogólnie dr Mariusz Puchalski opublikował 40 artykułów naukowych, z tego po uzyskaniu stopnia doktora 36. 37 z tych artykułów zostało opublikowanych w czasopiśmie z listy JCR, 1 w znaczącej międzynarodowej monografii, a dwa w materiałach międzynarodowych konferencji. Wśród czasopism są najbardziej cenione tytuły, takie jak Physical Review Letters (7 prac), Physical Review A (25), czy Journal of Chemical Physics (2). O randze tych czasopism świadczy sumaryczny IF, który dla wspomnianych 37 prac wynosi 136,27. O wadze prac Kandydata świadczy także liczba cytowań - 401 (bez autocytowań).

Dr Mariusz Puchalski prezentował swoje wyniki na polskich i międzynarodowych konferencjach naukowych. Wygłosił 7 referatów, w tym 2 na zaproszenie, i przedstawił 7 posterów w Polsce, Danii, Kanadzie, Szwecji, Hiszpanii, Francji i Włoszech. Czterokrotnie zapraszany był do wygłoszenia wykładów w znaczących instytucjach naukowych w Niemczech, Stanach Zjednoczonych i w Holandii.

Wysoko są oceniane projekty badawcze, w których dr Mariusz Puchalski wziął udział, już po uzyskaniu stopnia doktora. Kierował lub kieruje dwoma projektami OPUS Narodowego Centrum Nauki. Jako wykonawca współpracował w trzech dalszych projektach



badawczych NCN, w dwóch projektach National Institute of Standards and Technology w Stanach Zjednoczonych, jednym projekcie National Science Foundation (USA) i jednym projekcie Natural Sciences and Engineering Research Council (Kanada).

### **Recenzja rozprawy habilitacyjnej**

Tytuł rozprawy habilitacyjnej "Metody funkcji jawnie skorelowanych w obliczeniach efektów QED w układach atomowych i molekularnych" dobrze odzwierciedla zawartość cyklu 12 prac przedstawionych jako osiągnięcie badawcze. Prace zostały opublikowane w najlepszych międzynarodowych czasopismach: Physical Review Letters (4), Physical Review (7) i Journal of Chemical Physics (1), a ich łączny IF wynosi 52,554.

Dr Mariusz Puchalski w sposób całościowy podszedł do badanych problemów. Punktem wyjścia były badania w pracy doktorskiej wykonane dla atomu helu w ramach nierelatywistycznej mechaniki kwantowej. Metody obliczeniowe zostały w kolejnych pracach przez Kandydata rozwinięte o zagadnienia elektrodynamiki kwantowej oraz o techniki obliczeniowe dla układów trójelektronowych w bazie jawnie skorelowanych funkcji wykładniczych. Parę prac dotyczy układów czteroelektronowych, lecz w tym przypadku użyto bazy jawnie skorelowanych funkcji Gaussowskich. Obliczenia prowadzono dla lekkich atomów He, Li i Be oraz cząsteczki wodoru. W tych układach efekty relatywistyczne, wynikające z elektrodynamiki kwantowej oraz ze skończonej masy jądra mogły zostać uwzględnione na drodze rachunku zaburzeń aż do członów 7-ego rzędu względem stałej struktury subtelnej  $\alpha$ .

Chociaż prawie w każdej z przedstawionych w cyklu prac znajdują się nowe elementy związane z techniką obliczeń, to najbardziej spójne jej omówienie zawarte jest w pracy [H3] z 2008 roku. Należy podkreślić, że obliczenia energii w bazach kilkunastu tysięcy jawnie skorelowanych wykładniczych funkcji bazowych, a następnie wszystkich poprawek perturbacyjnych było możliwe dzięki zaproponowaniu wcześniej przez prof. Krzysztofa Pachuckiego rekurencyjnych wzorów dla obliczeń różnych potęg współrzędnych elektronowych i różnic tych współrzędnych. Te metody są przez Kandydata szeroko wykorzystywane i systematycznie rozwijane.

Dominujący wkład dr Mariusza Puchalskiego w zaproponowanie tematów badań, opracowanie algorytmów, napisanie programów i wykonanie obliczeń nie budzi wątpliwości. Na podstawie oświadczeń współautorów udział Kandydata w przedstawionych pracach szacowany jest na 70 – 90%. Tylko w jednej publikacji udział ten wynosi 50%, ale także w tej pracy podstawowym narzędziem badań był program napisany przez Kandydata.





Najważniejsze wyniki uzyskane w cyklu przedstawionych prac można podsumować w następujących punktach:

- 1) Dla układów z pozytonami uzyskanie wyników teoretycznych później potwierdzonych eksperymentalnie:
  - a. W ramach nierelatywistycznej elektrodynamiki kwantowej obliczenie czasu życia molekuly  $\text{Ps}^-$  [H1],
  - b. Wyznaczenie czasy życia i energii przejścia S-P w molekule  $\text{Ps}_2$  [H2].
- 2) Obliczenia dla układów atomowych trójelektronowych w bazie skorelowanych funkcji wykładniczych:
  - a. Precyzyjne obliczenie energii przejść linii  $D_1$  i  $D_2$  w atomie litu, a dzięki temu doprowadzenie do zgodności promieni ładunkowych wyznaczonych z przesunięcia izotopowego między  $^6\text{Li}$  i  $^7\text{Li}$  [H3, H4, H6],
  - b. Opracowanie oryginalnej metody wyznaczania struktury jądra z rozszczepienia nadsubtelnego, dla atomów  $^6\text{Li}$  do  $^{11}\text{Li}$  i kationów  $^7\text{Be}^+$  do  $^{14}\text{Be}^+$  [H5, H7, H8],
  - c. Wyznaczenie rozszczepienia subtelnego dla  $\text{Li}$  i  $\text{Be}^+$  z dokładnością odpowiadającą (lub przewyższającą) współczesnym pomiarom spektroskopowym, o 3-4 rzędy wielkości lepszą niż wyniki dotychczasowe [H9, H10].
- 3) Obliczenia stałych przesłaniania NMR:
  - a. Dla  $^3\text{He}$  otrzymano bardzo dokładną wartość stałej przesłaniania (błąd poniżej 1 ppm), która może być wykorzystywana jako standard NMR [H11],
  - b. W bazie skorelowanych funkcji Gaussa wyznaczono z dokładnością do 10 cyfr znaczących momenty magnetyczne deuteronu i trytonu, a stałą ekranowania Ramseya w pobliżu punktu równowagi z dokładnością do 8 cyfr znaczących; wszystkie wyniki są najdokładniejszymi w literaturze [H12].

Prace dr Mariusza Puchalskiego pozwalają na przewidywanie szeregu wartości fizycznych dla lekkich atomów i cząsteczek z dokładnością zbliżoną do pomiarów eksperymentalnych, a w niektórych przypadkach nawet je przewyższającą. Możliwe się to stało dzięki rozwojowi nowych koncepcji teoretycznych, co wymaga głębszej wiedzy z zakresu chemii kwantowej i elektrodynamiki kwantowej. Nowe algorytmy wymagają także zaawansowanych umiejętności z zakresu obliczeń komputerowych i programowania, również wykonania niestandardowych obliczeń o zwiększonej precyzji.



Przedstawiony jako osiągnięcie badawcze cykl 12 prac jest tematycznie powiązany i jest rozwiązaniem oryginalnego problemu badawczego, a zatem spełnia wszelkie wymogi Art.16 Ustawy o stopniach naukowych.

### **Dorobek dydaktyczny i organizacyjny**

Dr Mariusz Puchalski jeszcze jako doktorant na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego prowadził zajęcia zarówno z mechaniki klasycznej i kwantowej, jak i z metod obliczeniowych i programowania. Od 2010 roku pracuje jako adiunkt na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu prowadząc ćwiczenia z chemii teoretycznej, chemii kwantowej, modelowania kwantowo-chemicznego, podstaw chemii fizycznej, technologii informacyjnej i Internetu.

Dr Puchalski zdobył znaczące doświadczenie dydaktyczne, co pozwoliło mu na udział w opracowaniu sylabusów do przedmiotów „Chemia kwantowa” i „Obliczenia kwantowo-chemiczne” na Wydziale Chemii UAM. Współpracował także w projekcie w ramach Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki pt. „Wzmocnienie potencjału dydaktycznego UMK w Toruniu w dziedzinach matematyczno-przyrodniczych” w latach 2010-2015.

Znacząca pozycja naukowa Kandydata i umiejętność współpracy z innymi pracownikami były powodem powołania Go przez Dziekana Wydziału Chemii UAM do składów Zespołu oceniającego i Zespołu ds. rocznego wynagrodzenia motywacyjnego.

### **Podsumowanie**

Tematyka i wyniki badań prowadzonych przez dr Mariusza Puchalskiego lokują Go w czołówce specjalistów z zakresu obliczeń fizyki, chemii i elektrodynamiki kwantowej. Wyniki przez Niego uzyskiwane są obecnie standardami w obliczeniach dla lekkich atomów. Dobór tematów świadczy o dużej dojrzałości naukowej i samodzielności.

Uważam, że dr Mariusz Puchalski spełnia z nadstatkiem wszelkie kryteria stawiane kandydatom do stopnia naukowego doktora habilitowanego, zgodnie z Ustawą z dnia 14 marca 2003 roku o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz.U. nr 65, poz. 595, z późn. zm.) i wnoszę o dopuszczenie Habilitanta do dalszych etapów postępowania.



Prof. dr hab. Marek Kręglewski

