

Recenzja rozprawy habilitacyjnej dra Mariusza Puchalskiego na temat: “Metody funkcji jawnie skorelowanych w obliczeniach efektów QED w układach atomowych i molekularnych”

Sylwetka kandydata

Dr Mariusz Puchalski pracuje jako adiunkt naukowo-dydaktyczny, na Wydziale Chemii, Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Przebył interesującą drogę kariery zawodowej. Ukończył dwa kierunki studiów. W 2001 roku uzyskał stopień magistra informatyki, na Wydziale Matematyki, Informatyki i Mechaniki Uniwersytetu Warszawskiego. W tym czasie, już od dwóch lat pracował jako programista i projektant oprogramowania w przedsiębiorstwie “Telbank”. Wydaje się – sądząc po jego późniejszych osiągnięciach – że gdyby nie poświęcił się pracy naukowej, to byłby dzisiaj uznanym specjalistą w sprawach inżynierii oprogramowania. Pracę na wymienionym stanowisku kontynuował do roku 2003, godząc ją ze studiami na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego, które zakończyły się obroną pracy magisterskiej, wykonanej pod opieką prof. Krzysztofa Pachuckiego. Prof. Pachucki był również promotorem rozprawy doktorskiej mgra Puchalskiego, przygotowanej na tym samym wydziale i obronionej (z wyróżnieniem) w 2007 roku. Ich owocna współpraca naukowa nadal trwa.

Po uzyskaniu stopnia doktora nauk fizycznych, w zakresie fizyki, dr Puchalski pracował do roku 2010 w Instytucie Fizyki Teoretycznej Uniwersytetu Warszawskiego. Potem został zatrudniony na Uniwersytecie im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. W pracy tej dwa razy dostał nagrody Rektora, zaś w roku 2015 – stypendium naukowe Rektora. W latach, które upłynęły od obrony doktoratu, odbył liczne staże naukowe - raz w University of Alberta, dwukrotnie w Missouri University of Science and Technology i dwukrotnie w University of Delaware. Uczestniczył lub uczestniczył w realizacji dziewięciu projektów badawczych, finansowanych ze źródeł zewnętrznych, w tym czterech ze źródeł zagranicznych. Dwa razy pełni funkcję kierownika w projektach krajowych. Obecnie jest zaangażowany w realizację aż czterech projektów, finansowanych przez NCN. Jest kierownikiem jednego z nich.

Ocena rozprawy habilitacyjnej

Doktor Puchalski podejmuje w swoich pracach trudną i ciekawą tematykę, leżącą zdecydowanie poza tzw. głównym nurtem obliczeniowej chemii kwantowej. W metodach nakierowanych na badanie jak największych układów, niosących ze sobą, z konieczności, różne uproszczenia, sukcesem jest obliczenie energii z dokładnością, porównywalną z tą otrzymywaną w pomiarach kalorymetrycznych. Nazywana jest ona, w zawodowym żargonie, “dokładnością chemiczną” i jest rzędu $1 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}}$ (około 1 milihartree w jednostkach atomowych). Habilitant koncentruje się na małych układach, lecz poprzez uwzględnienie poprawek relatywistycznych i promienistych, stara się uzyskać wyniki, które mogą być porównywane z najlepszymi pomiarami. Te ostatnie z reguły są wykonywane metodami spektroskopowymi, dlatego mówimy o “dokładności spektroskopowej” w obliczeniach. Z terminem tym nie wiąże się zakres marginesu błędu, ustalony raz na zawsze i nie zależący od rodzaju badanego układu. W miarę doskonalenia technik eksperymentu, staje się on coraz węższy. W przypadku 2- i 3-elektronowych atomów i cząsteczek, jest o kilka rzędów wielkości mniejszy, niż był około 50 lat temu, gdy prof. Kołos i Wolniewicz wykonywali przełomowe obliczenia dla cząsteczki wodoru. W zależności od układu i konkretnego stanu, może wynosić 1 lub 100 nanohartree – ważne jest, że teoria nierelatywistyczna nie wystarczy obecnie, by konkurować na tym polu z doświadczeniem.

Jako rozprawa habilitacyjna przedstawiony został zestaw 12 artykułów, opatrzony autoreferatem. Wszystkie one mają dwóch lub trzech autorów, przy czym dr Puchalski występuje jako pierwszy autor 10 pozycji. Zadaniem recenzenta jest w tej sytuacji ocena znaczenia naukowego prac oraz udziału

kandydata w ich powstaniu, na podstawie dołączonych oświadczeń współautorów. Autoreferat jest napisany jasno i zwięźle, pozwolę sobie jednak na pewną krytyczną – choć nie całkiem merytoryczną – uwagę. Dr Puchalski kandyduje do stopnia doktora habilitowanego nauk chemicznych i mógłby wziąć pod uwagę, że jego osiągnięcie naukowe będą oceniać chemicy. Szkoda, że nie poświęcił kilku linii, w rozdziale, w którym omawia wyniki, na wprowadzenie układu jednostek. Chemika, nawet zajmującego się chemią kwantową, ale przywykłego do układu jednostek atomowych, nieco zaskakuje, podane bez żadnego wyjaśnienia, rozwinięcie energii w szereg potęgowej stałej struktury subtelnej (α). Pierwszy wyraz jest w nim proporcjonalny do α^2 , wiodące efekty relatywistyczne – do α^4 itd. Odpowiedź na pytanie, skąd wzięły się tak wysokie potęgi α , można odgadnąć na podstawie np. wskazanej w autoreferacie pozycji źródłowej nr 8. Zapisane w tej pracy prawo Coulomba zawiera w liczniku stałą struktury subtelnej, a nie kwadrat ładunku elementarnego. Oznacza to, że autor posługuje się układem jednostek, w którym prędkość światła w próżni jest równa jedności i zachodzi relacja $e^2 = \alpha$ — jak się okazuje, chętnie używanym w elektrodynamice kwantowej.

Dr Puchalski wykorzystuje w swoich pracach aparat teoretyczny rachunku zaburzeń, w którym punktem wyjścia są rozwiązania równania Schrödingera, z nieskończone ciężkimi jądrami atomowymi. Parametrami zaburzenia są stała struktury subtelnej (nierelatywistyczna elektrodynamika kwantowa) i stosunek masy elektronu do masy jądra atomowego (nieadiabatyczny rachunek zaburzeń). Dołączanie poprawek, które zmieniają dalekie cyfry znaczące energii stanów, ma sens, jeśli odpowiednio dokładne są same energie i funkcje nierelatywistyczne. Tych ostatnich nie da się wyznaczyć analitycznie dla układów wielociałowych. W w praktyce nie można ich nawet obliczyć wystarczająco dobrze, metodami wykorzystującymi rozwinięcie konfiguracyjne, zaimplementowanymi w powszechnie używanych programach komputerowych z zakresu chemii kwantowej. Habilitant opracował unikatowy warsztat obliczeniowy, w którym wykorzystywane są różne rodzaje jawnie skorelowanych funkcji bazowych – wykładniczych (Slatera), Hylleraasa i Gaussa. Elementy tego warsztatu są przedstawione w artykule H3, od którego rozpoczął przegląd, pomimo że nie jest pierwszy na liście pozycji wchodzących do osiągnięcia naukowego. Opisana w nim metoda obliczania trójelektronowych całek w bazie funkcji Hylleraasa, z operatorami zawierającymi odwrotności trzecich potęg odległości elektronu od jądra lub międzyelektronowych, pojawiającymi się w czło- nie Araki-Suchera w poprawkach promienistych, stanowi bowiem techniczny fundament całej serii prac (H4-H10). Pierwszym autorem jest prof. Krzysztof Pachucki, co nasuwa pytanie o samodzielny wkład habilitanta do tej części osiągnięcia naukowego. Jasną odpowiedź przynosi oświadczenie prof. Pachuckiego, który pisze, że był odpowiedzialny za uogólnienie teorii na układy litopodobne, natomiast rozwinięcie metod numerycznych i same obliczenia były zadaniem dra Puchalskiego. Uważam, że opracowanie i implementacja algorytmów obliczeniowych, które – mówiąc bardzo oględnie - nie są trywialne, gdy pracuje się z funkcjami Hylleraasa, stanowi istotny wkład do zastosowania teorii w praktyce.

Artykuły H1 i H2 dotyczą właściwości układów czysto leptonowych: anionu pozytonium (Ps^-) i dwupozytonium (Ps_2), nazywanego czasem – niezbyt trafnie, zdaniem piszącego te słowa – częściczką pozytonium. Układy te, zawierające antycząstki, nie są łatwe do wyprodukowania i żyją krótko, lecz ich znaczenie dla badań naukowych, prowadzonych na polach teorii i eksperymentu, jest nie do przecenienia. Zbudowane są one bowiem z cząstek nie mających wewnętrznej struktury. Porównanie wyników bardzo dokładnych obliczeń z doświadczeniem otwiera tutaj możliwości wyznaczania wartości elementarnych stałych fizycznych, a nawet poszukiwania niewielkich odstępstw od przewidywań ugruntowanej teorii. W pracy H1 obliczona została stała szybkości anihilacji Ps^- , z uwzględnieniem poprawek relatywistycznych i promienistych. Wprowadzenie wyrazu, związanego z poprawką relatywistyczną do funkcji falowej, wymagało rozwinięcia nowych elementów samego formalizmu. W chwili publikacji, wynik był około 500 razy dokładniejszy od wcześniejszych przewidywań, tysiąckrotnie dokładniejszy od pomiaru z roku 1983 i obecnie, po latach doskonalenia technik doświadczalnych, wciąż pozostaje około 50 razy dokładniejszy od pomiaru z roku 2011. Przedmiotem artykułu H2 są energie i stałe szybkości anihilacji stanów S i P Ps_2 , a także przewidywania

intensywności przejścia promienistego między tymi stanami. Podstawowym źródłem informacji o wielociałowych układach pozytonowych jest obecnie zjawisko anihilacji pary cząstka-antycząstka. Autorzy zwracają uwagę na możliwość wykorzystania spektroskopii optycznej. Energia opisanego przejścia została później faktycznie zmierzona, a wyniki tych pomiarów opublikowane w roku 2012, lecz margines błędu pomiarowego jest dziesiętkrotnie większy, niż przewidywań teoretycznych.

Wiodący udział doktora Puchalskiego w powstaniu prac H1 i H2, które są owocami staży naukowych w University of Alberta, jest niepodważalny. Ich współautor, prof. Czarnecki, pisze, że jego zespół nie miał wcześniej doświadczeń w fizyce układów wielociałowych, a swój łączny udział szacuje na około 10%.

Artykuły H4-H10, wykonane we współpracy z prof. Pachuckim i w jednym przypadku (H6) także z dr. Dariuszem Kędziera, dotyczą struktury stanów i linii widmowych atomu litu i kationu berylu. Od strony technicznej, używane były w nich metody opisane w artykule H3, a ponadto przedstawiono sposób obliczania logarytmu Bethego, występującego w poprawce promienistej rzędu α^5 . Interesujące jest podejście do poprawek rzędu α^6 i $\alpha^7 \ln \alpha$, dla których nie są znane formuły całkowania w bazie funkcji Hylleraasa, nadające się do praktycznego wykorzystania. Dlatego poprawki te były obliczane w bazie jawnie skorelowanych funkcji Gaussa i dodawane do wyników, otrzymanych w bazie funkcji Hylleraasa.

Uzyskane wyniki obejmowały teoretyczne przewidywania energii jonizacji, energii przejść promienistych, przesunięć izotopowych, rozszczepienia nadsubtelnego i subtelnego. Pozwoliły one na weryfikację rozbieżności pomiarów, a także na wyznaczenie parametrów struktury jąder atomowych – promieni ładunkowych. Konfrontacja z eksperymentem prowadzi jednak ostatecznie do konkluzji, że opis struktury jądra atomowego, jako niepunktowego i polaryzowalnego ładunku elektrycznego, obdarzonego magnetycznym momentem dipolowym, jest zanadto uproszczony. Wniosek ten jest dość nieoczekiwany dla chemika, choć nie sposób odmówić mu słuszności. W razie podjęcia tego wątku przez innych naukowców, przedstawione badania struktury elektronowej mogą zaowocować opracowaniem lepszych modeli jądra atomowego, a to już wykracza poza domenę chemii. Mamy tu do czynienia ze znakomitym przykładem zazębiania się różnych dyscyplin naukowych, jeśli tylko wnikiemy wystarczająco głęboko w przedmiot badań.

Nie mam wątpliwości co do wiodącego udziału habilitanta w powstaniu prac H4-H10. Jest ich pierwszym autorem, a współautorzy oceniają swój wkład na około 20% (prof. Pachucki) i 10% (dr Kędziera).

Pozostałe dwa artykuły, H11 i H12, poświęcone są ekranowaniu magnetycznemu w lekkim izotopie helu i w izotopomerach cząsteczki wodoru. Praca H11, w której obliczono stałą ekranowania magnetycznego ^3He , z uwzględnieniem poprawek relatywistycznych i promienistych, jest jedyną, której dr Puchalski jest jednym z równorzędnych autorów. Tak przynajmniej wynika z oświadczenia dra Rudzińskiego – pierwszego autora, odpowiedzialnego za wyprowadzenie odpowiednich operatorów. Można jednak sądzić, że bez warsztatu obliczeniowego habilitanta, uzyskanie wyników zajęłoby bez porównania więcej czasu. Praca ta jest ważna, gdyż stała ekranowania, równa około 60 ppm, została wyznaczona z błędem około 0.1 ppb – według autorów, najdokładniej ze wszystkich atomów. Dr Puchalski wskazuje w autoreferacie możliwość wykorzystania ^3He jako standardu NMR. W tym miejscu natychmiast nasuwa się pytanie, czy stała ekranowania atomowego wodoru nie jest znana jeszcze dokładniej, lecz zakładam, że autorzy mieli na myśli atomy, które nie rekombinują do cząstek.

W pracy H12, wykonanej we współpracy z prof. Komasa i prof. Pachuckim, wyznaczone zostały różnice stałych ekranowania izotopów wodoru w cząsteczkach HD i HT, a wyniki, w połączeniu z częstościami znanymi z widm NMR, zostały użyte do obliczenia wartości momentów magnetycznych jąder deuteru i trytu. Zwracam uwagę, że nie pojawiają się w niej, w żadnej formie, poprawki promieniste. W związku z tym można podać w wątpliwość, czy jej treść pasuje do tematu rozprawy habilitacyjnej. Oczywiście rozwiązuje ona pewien problem naukowy i ma znaczenie w dorobku habilitanta. Uważam jednak, że dr Puchalski mógł inaczej sformułować temat, lub pominąć pozycję

H12, ponieważ pozostałych 11 publikacji wystarczy, moim zdaniem, by spełnić warunki stawiane kandydatowi do stopnia doktora habilitowanego.

Całość dorobku naukowego, działalność dydaktyczna i organizacyjna

Dr Puchalski jest autorem 40 publikacji naukowych, w tym dwóch artykułów konferencyjnych i jednego rozdziału w monografii. 36 pozycji zostało opublikowanych po uzyskaniu stopnia doktora. Tematyka tych prac obejmuje bądź to wysoce dokładne obliczenia różnych właściwości układów kilkuelektronowych ("największym" jest atom boru), często z uwzględnieniem efektów przewidywanych przez elektrodynamikę kwantową, bądź to same metody obliczeniowe, w których wykorzystywane są bazy funkcji jawnie skorelowanych. Zdecydowana większość artykułów ukazała się w czasopiśmie, ciesząc się najwyższym uznaniem w kręgach naukowych – 7 w *Physical Review Letters*, 25 w *Physical Review A*, 2 w *Journal of Chemical Physics*. Doczekały się około 400 cytowań. Łączny Impact Factor prac, opublikowanych w czasopiśmie z listy ISI, przekracza 130, a indeks Hirscha, według bazy Web of Science, wynosi 12. Przy całym dystansie, jaki warto zachować wobec wskaźników liczbowych, "mierzących" jakość pracy naukowej, trzeba przyznać, że wartości te są bardzo dobre, jak na osobę starającą się o uzyskanie stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk chemicznych, w dyscyplinie chemia. Ponad wszelką wątpliwość świadczą o wysokiej aktywności naukowej kandydata i o tym, że jego osiągnięcia są dostrzegane i doceniane.

Dr Puchalski rozpowszechnia wyniki swoich badań na konferencjach naukowych. W latach 2007-2013 wygłosił 5 referatów, w tym 2 na zaproszenie i zaprezentował 7 plakatów. Ponadto czterokrotnie był zapraszany do wygłoszenia wykładów, przez zagraniczne instytucje naukowe. To też jest świadectwem uznania, jakim cieszy się jego praca w środowisku naukowym.

Działalność dydaktyczna kandydata jest typowa dla adiunkta ze stopniem doktora, jeśli chodzi o prowadzenie ćwiczeń z przedmiotów, powiązanych z jego specjalnością, w zakresie fizyki, chemii teoretycznej i fizycznej oraz szeroko rozumianych technologii informacyjnych. Na wyróżnienie zasługuje natomiast autorski wykład z laboratorium: "Metody obliczeniowe". Nie każdy nauczyciel akademicki, na tym etapie kariery, może się poszczycić przedmiotem o takiej randze, a stopień doktora habilitowanego tradycyjnie, choć niekoniecznie formalnie, wiąże się z prawem do wykładania. Jak widać, habilitant ma już na tym polu pewne doświadczenie.

Dr Puchalski brał udział w opracowywaniu sylabusów do dwóch przedmiotów, prowadzonych na Wydziale Chemii UAM, a także w realizacji projektu w ramach programu operacyjnego "Kapitał Ludzki". W zakresie opieki nad studentami, współpracował z panem Adamem Rudzińskim, gdy ten wykonywał pracę magisterską u prof. Pachuckiego i był opiekunem prac licencjackiej i magisterskiej pana K. Zamojskiego (promotorem był prof. Komasa). Jest członkiem Zespołu oceniającego i Zespołu d/s rocznego wynagrodzenia motywacyjnego, działających na Wydziale Chemii UAM.

Wniosek końcowy

Po zapoznaniu się z osiągnięciami dra Puchalskiego stwierdzam, że po doktoracie uzyskał on znakomity dorobek naukowy. Jest doświadczonym dydaktykiem, a w działalność organizacyjną angażuje się w rozsądnym stopniu. Z przedstawionych prac i przebiegu pracy wyłania się obraz samodzielnego badacza, aktywnie pozyskującego środki na badania, obdarzonego – jakże cenną – umiejętnością nawiązywania efektywnej współpracy.

Wyrażam opinię, że przedstawione do oceny osiągnięcie naukowe dra Mariusza Puchalskiego, w postaci cyklu publikacji powiązanych tematycznie, stanowi znaczny wkład w rozwój chemii kwantowej i spełnia kryteria, stawiane w postępowaniu habilitacyjnym, określone w art. 16 ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki, z dnia 14 marca 2003 roku wraz z późniejszymi zmianami oraz w rozporządzeniu Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego, z dnia 1 września 2011 roku. Uważam, że spełnione są również wszelkie zwyczajowe warunki, stawiane osobom ubiegającym się o stopień doktora habilitowanego. Wnoszę o dopuszczenie kandydatury dra Mariusza Puchalskiego do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

Krzysztof Strasburger

