

Prof. dr hab. Jacek Korchowiec
Zakład Chemii Teoretycznej
im. Prof. K. Gumińskiego
Wydział Chemii UJ
ul. Gronostajowa 2
30-387 Kraków

Kraków, 09.05 2022 r.



UNIwersytet
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

RECENZJA
dorobku naukowego dr Mariusz Pawłaka
włączonego do rozprawy habilitacyjnej

zatytułowanej

„Niskoenergetyczne zderzenia atomów z cząsteczkami”

Wydział Chemii

Uwagi ogólne

Istotnym elementem każdego osiągnięcia habilitacyjnego jest aktywność naukowa realizowana w więcej niż jednej instytucji. Za sprawą licznych staży w ośrodkach zagranicznych, kariera naukowa dr inż. Mariusza Pawłaka nabrała wymiaru międzynarodowego. Można śmiało powiedzieć, że jest przykładem osoby która potrafiła wykorzystać możliwości jakie dała młodemu pokoleniu już osiemnastoletnia obecność Polski w Unii Europejskiej. Poza długoterminowym, rocznym stażem podoktorskim w Izraelskim Instytucie Technologii - Technion w grupie prof. Nimroda Moiseieva (2013-2014, Haifa, Izrael), odbył szereg staży krótkoterminowych. Wśród wielu instytucji naukowych, które odwiedził kandydat do stopnia naukowego doktora habilitowanego, były jednostki europejskie (Niemcy Szwecja, Węgry), azjatyckie (Indie, Izrael) i amerykańskie (USA). Część z tych staży miało miejsce przed uzyskaniem stopnia doktora.

Ścieżki edukacyjna i zawodowa dr inż. Mariusza Pawłaka związane są z Toruniem, a ściślej rzecz ujmując Uniwersytetem Mikołaja Kopernika. Tytuł zawodowy inżyniera fizyki technicznej (2004) i magistra fizyki technicznej (2006) uzyskał na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej (WFAIS). Na tym Wydziale realizował także doktorat. Zwieńczeniem tego etapu jego rozwoju naukowego była obrona pracy doktorskiej zatytułowanej „*Stany związane i rezonansowe układów kwantowych w polu elektromagnetycznym oraz otoczeniu plazmy*” w 2012 roku, którą wykonał pod kierunkiem prof. dr hab. Mirosława Bylickiego w Zakładzie Mechaniki Kwantowej Instytutu Fizyki. Od 2008 roku zatrudniony jest na Wydziale Chemii UMK, najpierw na etacie inżynierjno-technicznym, a od 2010 roku na etatach naukowo-dydaktycznych przechodząc przez kolejne szczeble kariery akademickiej. W latach 2010-2018 był zatrudniony na etacie asystenta. W 2018 roku został zatrudniony na stanowisku adiunkta.

ul. Gronostajowa 2

30-387 Kraków

tel. +48 12 686 26 00

fax +48 12 686 27 50

sekretar@chemia.uj.edu.pl

www.chemia.uj.edu.pl

Tematyka badawcza uprawiana przez Habilitanta obejmuje kilka zagadnień. W swojej dotychczasowej karierze naukowej dr inż. Mariusz Pawlak zajmował się: atomami w silnym polu laserowym, stanami rydbergowskimi atomów i jonów, stanami boromejskimi trójcząstkowych jonów molekularnych, przecięciem stożkowym indukowanym polem laserowym i niskoenergetycznymi zderzeniami atom-cząsteczka dwuatomowa. To ostatnie zagadnienie stanowi podstawę jego osiągnięcia habilitacyjnego. Habilitant w oparciu o aparat teoretyczny tłumaczy bardzo wyrafinowany eksperyment związany z reakcją jonizacji Penninga, tzn. wyznaczeniem przekrojów czynnych (stałych szybkości) w granicy niskich temperaturach, można powiedzieć w granicy zera bezwzględnego, w oparciu o eksperyment skrzyżowanych wiązek z pulsacyjnymi, chłodzonymi kriogenicznie źródłami naddźwiękowymi. Jest to tematyka bardzo aktualna. Doniesienie o reakcji jonizacji Penninga przeprowadzonej w temperaturze poniżej 1K przez grupę Edvardasa Nareviciusa z Instytutu Weizmanna (łączenie dwóch szybkich wiązek naddźwiękowych) opublikowano na łamach Science w 2012 roku. Niezależny eksperyment w temperaturze poniżej 1K przeprowadzono w laboratorium Andreasa Osterwaldera w Lozannie w 2014 roku dla kilku innych układów molekularnych. Pierwsza praca Habilitanta związana z tą tematyką ukazała się w 2015 roku. Można powiedzieć, że Kandydat do stopnia doktora habilitowanego znalazł się w odpowiednim miejscu i czasie. W 2013 roku przebywał na stażu podoktorskim w grupie Nimroda Moiseyeva. Pobyt ten za sprawą szefa grupy zaowocował kontaktem z laboratorium Edvardasa Nareviciusa, który przełożył się na 4 wspólne prace, wchodzące do cyklu habilitacyjnego [H1-H3, H6]. Należy tutaj także wspomnieć, że w siedmiu publikacjach cyklu [H1-H7] współautorem jest Nimrod Moiseyev. Pokazuje to, że współpraca z grupą Nimroda Moiseyewa jest kontynuowana i przynosi wymierne efekty.

Dorobek naukowy Kandydata do stopnia doktora habilitowanego jest bardzo dobry. W dniu składania wniosku obejmował 20 publikacji naukowych. Dziewięć z nich zostało włączone do osiągnięcia habilitacyjnego. Wszystkie czasopisma, w których Habilitant opublikował wyniki badań należą do listy JCR; ich łączny współczynnik oddziaływania przekracza 86 (punktacja ministerialna powyżej 2000). Prace te były cytowane 236 razy. Indeks H dr inż. Mariusza Pawlaka jest równy 10 (Web of Science). Uzyskane przez niego rezultaty były prezentowane w formie wykładów, tak poza UMK (8 wykładów), jak i w jednostce macierzystej (13 prezentacji seminaryjnych). Uczestniczył w 21 konferencjach naukowych, na których wygłosił 8 komunikatów i miał 13 prezentacji plakatowych. Większość z tych prezentacji miało miejsce po uzyskaniu stopnia doktora. Jego zaangażowanie w prowadzenie badań naukowych było kilkakrotnie zauważone. Uzyskał dwukrotne wyróżnienie Rektora UMK i trzykrotnie nagrodę Dziekana Wydziału Chemii. Był beneficjentem programu SKILLS Fundacji na rzecz Nauki Polskiej i laureatem programów TransFormation.doc i Mobility Plus koordynowanych przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego. Jedna z jego prac (praca H2) wchodząca do cyklu habilitacyjnego, została zaliczona przez Ministerstwo do grupy najważniejszych osiągnięć polskiej nauki w 2016 roku.

Złożona przez Kandydata dokumentacja wskazuje, że wniosek ten nie był wcześniej procedowany. Zostanie przeze mnie oceniony pod kątem spełnienia kryteriów ustawowych (art. 219 ust. 1 ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20 lipca 2018 roku),

zgodnie z którą kandydat do stopnia naukowego: (i) posiada stopień doktora; (ii) posiada w dorobku cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych, wnoszących znaczny wkład w rozwój dyscypliny naukowej; (iii) wykazuje się istotną aktywnością naukową, realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej, w szczególności zagranicznej. W związku z zapisami ustawy ograniczę się do punktu drugiego, niemniej przedstawię swoje stanowisko dotyczące innych punktów na potrzeby prac Komisji powołanej przez Radę Doskonałości Naukowej.

Ocena osiągnięcia habilitacyjnego

Dostarczone mi materiały związane z osiągnięciem habilitacyjnym dr Mariusza Pawłaka zatytułowanym „*Niskoenergetyczne zderzenia atomów z cząsteczkami*” zawierają wszystkie dokumenty niezbędne do oceny wniosku i przeprowadzenia postępowania habilitacyjnego. Dokumentacja przygotowana jest w dwóch wersjach językowych. Zawiera wszystkie załączniki, w tym kopie publikacji. W autoreferacie omówiono cele prowadzonych badań oraz przedstawiono w zwartej formie najważniejsze wyniki osiągnięcia naukowego. Zgodnie z wymogami w przesłanej dokumentacji zamieszczono informacje o pozostałych publikacjach wchodzących w skład dorobku naukowego Kandydata do stopnia doktora habilitowanego.

Osiągnięcie habilitacyjne dr inż. Mariusza Pawłaka to cykl złożony z 9 artykułów naukowych. Wszystkie prace zostały opublikowane w bardzo dobrych czasopismach o zasięgu międzynarodowym. Lista tytułów obejmuje: Journal of Chemical Physics (H1), Nature Physics (H2), Journal of Physical Chemistry A (H3), Journal of Chemical Theory and Computation (H4, H5, H7, H8), Journal of Physical Chemistry Letters (H6) i Journal of Mathematical Chemistry (H9). Łączny IF prac opublikowanych w tych czasopism przekracza 60. Artykuły te zostały opublikowane w latach 2015-2021. Wszystkie prace cyklu habilitacyjnego są wieloautorskie. Liczba współautorów waha się od dwóch do jedenastu osób. W czterech publikacjach cyklu habilitacyjnego dr inż. Mariusz Pawlak jest autorem korespondencyjnym, a w sześciu z nich pierwszym autorem. We wszystkich publikacjach Habilitant był odpowiedzialny za część teoretyczną i obliczeniową, tzn. sformułowanie i rozwój teorii adiabatycznej dla zimnych zderzeń atomów z cząsteczkami dwuatomowymi w ujęciu wariacyjnym i perturbacyjnym, przygotowanie autorskiego programu do wykonania obliczeń tymi metodami, optymalizację stworzonego kodu, uzupełnianie kodu źródłowego o nowe elementy, wykonanie obliczeń i analizę uzyskanych rezultatów. Za wyjątkiem pracy H2 Habilitant był odpowiedzialny za opracowanie [H1, H3, H8, H9] lub współpracowanie [H4, H6, H7] koncepcji badań, udział w dyskusji i przygotowanie manuskryptów. W pracy H2, ze względu na silną reprezentację eksperymentatorów, wkład Habilitanta związany był z wykonaniem obliczeń i dyskusją uzyskanych rezultatów. Oświadczenia współautorów pozostają w zgodzie z opisem przygotowanym przez Kandydata.

Pan dr inż. Mariusz Pawlak w swoim osiągnięciu habilitacyjnym poddał wnikliwej z punktu widzenia teoretycznego analizie reakcję jonizacji Penninga. W przypadku Habilitanta reakcja dotyczyła zderzenia wzbudzonego atomu helu z cząsteczką wodoru: $\text{He}^* + \text{H}_2 \rightarrow \text{He} + \text{H}_2^+ + e^-$. Rozpatrzył szereg modyfikacji tej reakcji, wynikających z podstawienia izotopowego (H/D, $^4\text{He}/^3\text{He}$), odmiany spinowej cząsteczek wodoru (orto/para) i sposobem wzbudzenia (konfiguracją elektronową) atomu helu. Habilitant skoncentrował się na subkelwinowych temperaturach. W granicy niskich temperatur pojawiają się stany rezonansowe. Obecność takich stanów znajduje odzwierciedlenie w takich mierzalnych wielkościach jak przekroje czynne lub bezpośrednio z nimi związane stałe szybkości.

Nawet jakościowe wytłumaczenie anomalii pojawiających się w przekrojach czynnych wyznaczonych w funkcji energii zderzenia wymaga stworzenia odpowiedniego modelu obliczeniowego. Habilitant na potrzeby reakcji jonizacji Penninga sformułował wariacyjną teorię adiabatyczną. Sam formalizm nie ogranicza się wyłącznie do wcześniej wspomnianego procesu. W dużym skrócie metoda sprowadza się do rozwiązywania jednowymiarowego równania Schrödingera z odpowiednio zdefiniowanym efektywnym potencjałem adiabatycznym. Równanie takie rozwiązuje się numerycznie dla każdego z efektywnych potencjałów (adiabat) z osobna. Konstrukcja efektywnego potencjału nie jest sprawą trywialną. Wyznacza się go przez diagonalizację macierzowej reprezentacji operatora energii potencjalnej w bazie będącej iloczynem kartezjańskim dwóch niezależnych zbiorów harmonik sferycznych (rotacja cząsteczki H_2 i rotacja układu $\text{H}_2\cdots\text{He}^*$ jako całości). Wymiar takiej macierzy może być bardzo duży, a to za sprawą potęgowej zależności od przyjętych maksymalnych wartości rotacyjnych liczb kwantowych. Należy tutaj podkreślić, że wyprowadzono analityczne wzory na wszystkie całki pojawiające się w pierwszym, jak i późniejszych wariantach opracowanego formalizmu. Oczywiście, cały formalizm powinien dawać wiarygodne wyniki dla dobrze rozseparowanych adiabat.

Cykl Habilitacyjny ilustruje metamorfozę jaką przeszła wariacyjna metoda adiabatyczna opracowana dla zderzeń zimnych w trakcie analizy kolejnych danych eksperymentalnych. Można tu zauważyć zarówno przesłanki fizyczne, związane z rozszerzeniem metody o wcześniej nieuwzględniane efekty, jak i numeryczne, związanymi ze zmianą procedur obliczeniowych. Praktycznie każda praca cyklu wносиła nowy element do opracowanej metody. W pracy H1 cząsteczka dwuatomowa mogła znaleźć się tylko w podstawowym stanie rotacyjnym. Ograniczenie to usunięto w pracy H3, dzięki czemu stan rotacyjny cząsteczki dwuatomowej nie był ograniczony i cząsteczka mogła się znaleźć w dowolnym stanie rotacyjnym. Zmiana sposobu wyznaczania stałej szybkości reakcji jonizacji w H5 przełożyła się na zmianę sposobu rozwiązywania równania Schrödingera. Wyjście poza przybliżenie rotatora sztywnego w H7 pozwoliło przeanalizować wpływ drgań na pojawiające się rezonanse. Część zmian podyktowanych było wyborem metodologii obliczeniowej związanej ze strukturą elektronową układu.

W cyklu prac da się zauważyć dążenie autora do poprawy stworzonego narzędzia obliczeniowego. Przejście od jakościowego do ilościowego odtworzenia danych eksperymentalnych, przekładało się na modyfikację metodologii obliczeniowej, o czym

wspomniałem w poprzednim paragrafie, jak i detaliczne zrozumienia „działania” już stworzonego narzędzia. Zaowocowało to wieloma cennymi wnioskami i obserwacjami. Mam tu na myśli mechanizm pojawiania się i zaniku rezonansów, rolę anizotropii w zimnych zderzeniach, wpływ niesztymności wiązania w cząsteczce dwuatomowej na rozkład i intensywności rezonansów, potwierdzenie kinetycznego efektu izotopowego.

Nie mam wątpliwości, że przedstawiony cykl jest spójny tematycznie i rozwiązuje istotne problemy naukowe. Kandydat do stopnia doktora habilitowanego znalazł bardzo ciekawą tematykę badawczą i konsekwentnie ją realizuje. Pewnym mankamentem tej tematyki jest jej unikatowość, a tym samym niszowość badań. Sam eksperyment połączonych wiązek naddźwiękowych wykonywany jest tylko w nielicznych laboratoriach na świecie. Habilitant miał okazję zapoznać się z tą techniką w Instytucie Weizmanna w Izraelu. W konsekwencji ograniczona liczba grup teoretycznych zajmuje się modelowaniem zimnych zderzeń atomów z cząsteczkami dwuatomowymi. Może to mieć także zalety, tzn. konsekwentny rozwój opracowanej metodologii obliczeniowej daje dr inż. Mariuszowi Pawlakowi możliwość stworzenia własnej, dobrze rozpoznawalnej szkoły badawczej. Mimo usunięcia wielu rozbieżności pomiędzy eksperymentem a teorią, temat nie jest zamknięty i pozostaje jeszcze wiele problemów do rozwiązania. Moje zastrzeżenia budzi tylko tytuł osiągnięcia habilitacyjnego, który wydaje się być zbyt obszerny w stosunku do analizowanych układów molekularnych i możliwych kanałów reakcyjnych, oraz kilka konkluzji, które wydają się być nazbyt kategoryczne w wydźwięku. Niemnie, zakładam, że w tytule autor zawarł także kierunki swoich przyszłych badań naukowych.

Ocena dorobku dydaktycznego

Pan dr Mariusz Pawlak od 2010 roku jest pracownikiem naukowo-dydaktycznym Wydziału Chemii UMK. W trakcie tego okresu prowadził szereg zajęć dydaktycznych (ćwiczenia i laboratoria komputerowe): Podstawy chemii kwantowej, Chemia teoretyczna, Podstawy użytkowania systemu Linux, Wstęp do programowania, Matematyka, Matematyka z elementami statystyki, Podstawy chemii analitycznej oraz Programowanie i metody numeryczne. Należy tutaj zwrócić uwagę na ćwiczenia z Podstaw chemii analitycznej - przedmiotu którego zapewne Habilitant nie realizował w trakcie studiów na WFAIS, a tym samym wymagającym od niego większego zaangażowania. Pozostałe prowadzone przez niego zajęcia pozostają w zgodzie z jego wykształceniem zdobytym w trakcie studiów I i II stopnia na WFAIS.

Istotnym elementem dydaktyki jest indywidualna praca ze studentami. Opieka/promotorstwo jest szczególnym, bardzo indywidualnym i czasochłonnym trybem nauczania, często przygotowującym studenta do pracy naukowej w grupie bezpośredniego przełożonego. Pan dr Mariusz Pawlak pełnił funkcję promotora w 4 pracach licencjackich. Nie jest to imponująca liczba, jak na 10 letni czas pracy. Należy jednak pamiętać, że chemia kwantowa, a Habilitant jest członkiem Zespołu Chemii Kwantowej i Spektroskopii Atomowej, ze względu na trudność i złożoność przedmiotów teoretycznych, nie cieszy się dużą

popularnością wśród większości studentów. Ponadto, Habilitant jest promotorem pomocniczym w dwóch przewodach doktorskich.

Dotarcie do szerokiego grona odbiorców przez popularyzację nauki jest bardzo ważne z punktu widzenia każdej uczelni. Pozwala to przyciągnąć w jej mury wielu nowych studentów. Habilitant nie stronił od tego typu aktywności. Będąc studentem i doktorantem WFAIS brał udział w warsztatach/pokazach Toruńskiego Festiwalu Nauki i Sztuki (2005-2009). W 2007 roku prowadził warsztaty z fizyki dla uczniów szkół ponadpodstawowych. W 2019 roku był jednym z prowadzących dwutygodniową szkołę dla doktorantów polskich i zagranicznych „*Toruń Astrophysics, Spectroscopy and Quantum Chemistry School*”. Szkoda, że w tym punkcie autoreferatu nie podał więcej szczegółów, formy zajęć i ich tematyki.

Ocena dorobku organizacyjnego

Działalność organizacyjna dr Mariusza Pawlaka związana jest z projektami badawczymi. Kandydat ma na tym polu spore sukcesy. Oprócz wykonawstwa w kilku projektach, w tym międzynarodowych, należy wspomnieć o projektach, w których pełnił rolę kierownika. Po uzyskaniu stopnia doktora kierował trzema wewnętrznymi projektami badawczymi. Były to projekty Wydziału Chemii UMK dla młodych naukowców przyznane mu w 2013, 2015 i 2016 roku. W poszukiwaniu funduszy na prowadzenie badań nie ograniczał się wyłącznie do macierzystej jednostki. W latach 2013-2014 kierował projektem Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego „*Stany rezonansowe układów atomowych w silnym polu laserowym*” przyznany mu w ramach programu *Mobilność Plus*. W latach 2017-2018 kierował projektem „*Stworzenie unikatowego programu komputerowego do badania stanów rezonansowych molekuł rydbergowskich*” w programie *Miniatura* przyznany mu przez Narodowe Centrum Nauki. W przypadku Habilitanta realizacja obu projektów jest dowodem na to, że szczytne cele przyświecające pomysłodawcom programów *Mobility Plus* i *Miniatura* zostały osiągnięte. Celem programu *Mobilność Plus* jest umożliwienie młodym naukowcom prowadzenia badań naukowych w wiodących, zagranicznych ośrodkach naukowych pod kierunkiem wybitnych indywidualności świata nauki, natomiast celem programu *Miniatura* jest prowadzenie badań pilotażowych, odbycie stażu naukowego, wyjazdu badawczego lub wyjazdu konsultacyjnego służącego przygotowaniu przyszłego projektu badawczego. Staż podoktorski Habilitanta w Izraelu i realizacja projektu badawczego „*Rozwój wariacyjnej teorii adiabatycznej dla eksperymentów zimnych zderzeń atom-molekuła dwuatomowa*” uzyskanego w Narodowym Centrum Nauki (program *Sonata*) pokazują, że cele te zostały osiągnięte. To co najistotniejsze, większość prac wchodzących do osiągnięcia habilitacyjnego (prace H5-H9) powstało w trakcie realizacji projektu w programie *Sonata*.

Dorobek naukowy uzyskany w trakcie realizacji projektów naukowych przyczynił się do większej rozpoznawalności pana dr inż. Mariusza Pawlaka na arenie krajowej, co zaowocowało członkostwem w licznych gremiach. Był członkiem Zespołu Specjalistycznego ZS-2 w Ministerstwie Nauki i Szkolnictwa Wyższego, członkiem Rady Młodych Naukowców V kadencji w MNiSW, członkiem priorytetowego zespołu badawczego TASQ Force, członkiem Rady Młodych Wydziału Chemii UMK. Aktualnie jest członkiem Uniwersyteckiego

Centrum Doskonałości w obszarze badawczym astrofizyka i astrochemia, oraz członkiem komitetu organizacyjnego międzynarodowej konferencji naukowej „Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP)”, który odbędzie się w czerwcu 2022 roku w Toruniu.

Uwagi końcowe

Stopień doktora habilitowanego oznacza osiągnięcie samodzielności naukowej. Habilitant już wykazał się dużą samodzielnością. Mam tu na myśli bardzo konsekwentną realizację badań naukowych, pozyskiwanie funduszy na ich prowadzenie i działalność organizacyjną na rzecz społeczności akademickiej. Te formy jego działalności wskazują, że równie pręźnie przystąpi do budowy własnego zespołu naukowego. Dodatkowo, należy zwrócić uwagę na duży rozmach Habilitanta w nawiązywaniu współpracy naukowej z licznymi ośrodkami. Biorąc pod uwagę spójny przekaz prac wchodzących w skład osiągnięcia habilitacyjnego i ich wagę naukową nie mam wątpliwości, że jest to bardzo wartościowe osiągnięcie. Reasumując, uważam, że **całokształt dorobku naukowego dr inż. Mariusza Pawlaka, Jego zaangażowanie w działalność naukową w pełni uzasadniają wystąpienie do Rady Dyscypliny Nauki Chemiczne Wydziału Chemii Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu o nadanie mu stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne.** Rozprawa habilitacyjna Kandydata spełnia wszystkie wymogi stawiane rozprawom habilitacyjnym, określone w art. 219 ust. 1 ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20 lipca 2018 roku i wnoszę o dopuszczenie pana dr inż. Mariusza Pawlaka do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.



Jacek Korchowiec