



Poznań, dnia 3 marca 2022 r.

Opinia w postępowaniu habilitacyjnym dra Mariusza Pawlaka

1 Informacje wstępne

Dr Mariusz Pawlak ukończył studia na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu. W roku 2006 obronił pracę magisterską zatytułowaną „Efekt Starka w atomie wodoru”. Cztery lata później, na tym samym Wydziale, uzyskał stopień doktora za rozprawę zatytułowaną „Stany związane i rezonansowe układów kwantowych w polu elektromagnetycznym oraz w otoczeniu plazmy”. W obu przypadkach promotorem był prof. dr hab. Mirosław Bylicki. Obecnie dr Pawlak zajmuje stanowisko adiunkta na Wydziale Chemii UMK.

W ramach obowiązków dydaktycznych prowadził zajęcia m. in. z chemii kwantowej, informatycznej i analitycznej oraz z matematyki i programowania. Był też promotorem czterech prac licencjackich i promotorem pomocniczym dwóch prac doktorskich. Angażował się w różne aspekty działalności organizacyjnej uczelni, m. in. administrując zasobami sieciowymi i obliczeniowymi Katedry Chemii Kwantowej i Spektroskopii Atomowej. Brał aktywny udział w uczelnianych wydarzeniach popularyzujących naukę. Za swoje osiągnięcia naukowe oraz za działalność na rzecz uczelni był wielokrotnie wyróżniany przez Rektora UMK i Dziekana Wydziału Chemii UMK.

2 Ocena dorobku naukowego

Na dorobek naukowy dra Pawlaka składa się 20 artykułów opublikowanych, poza jednym wyjątkiem, w czasopiśmie międzynarodowych. Wśród nich uwagę przykuwa artykuł, który ukazał się w roku 2017 w czasopiśmie *Nature*

Physics o współczynniku wpływu $IF=23$. Według *Web of Science*, publikacje Habilitanta były cytowane 244 razy dając indeks Hirscha równy 10. Przytoczone dane bibliometryczne dotyczące cytowań nie odbiegają od przeciętnego poziomu dla dorobku habilitacyjnego.

Poza tematyką zawartą w osiągnięciu habilitacyjnym, dr Pawlak prowadził wspólnie z prof. Bylickim badania dotyczące egzotycznych układów trójcząstkowych oraz rezonansów Starka w atomie wodoru. Brał udział w badaniach stanów rydbergowskich atomu rubidu i kationu wapnia oraz efektów indukowanych światłem laserowym w atomach i cząsteczkach dwuatomowych.

Z całkowitego dorobku dr Pawlak wyselekcjonował 9 publikacji, które przedstawił jako osiągnięcie naukowe stanowiące podstawę wniosku o nadanie stopnia doktora habilitowanego. Ustawowym wymaganiem jest aby publikacje te były powiązane tematycznie. Z treści tych artykułów wynika jednoznacznie, iż wszystkie one dotyczą badania zderzeń wzbudzonych atomów helu z cząsteczką wodoru w jej różnych odmianach izotopowych. Cykl ten, zatytułowany „Niskoenergetyczne zderzenia atomów z cząsteczkami dwuatomowymi”, spełnia więc bez zastrzeżeń wymóg spójności tematycznej osiągnięcia naukowego.

W przedstawionym do oceny osiągnięciu można znaleźć elementy rozwoju teorii i metod kwantowomechanicznych oraz raportów z ich implementacji w formie programów komputerowych. Jednym z głównych celów opisanych badań jest interpretacja wyników eksperymentów rozproszeniowych w układzie wzbudzony atom – cząsteczka dwuatomowa. Punktem wyjścia do opisanych w cyklu habilitacyjnym badań było rozszerzenie istniejącej teorii zderzeń. Zaprezentowane w publikacji H1 nowe podejście, nazwane przez autora wariacyjną teorią adiabatyczną (AVT), stanowi rdzeń wszystkich dalszych poczynań opisanych w tym cyklu. Jego kolejne składniki pokazują ewolucję wariacyjnej teorii adiabatycznej poprzez jej udoskonalanie, znoszenie ograniczeń i rozszerzanie możliwości. Dobrym przykładem jest tutaj publikacja H3, w której wprowadzona została swoboda w wyborze stanu rotacyjnego układu przy jednoczesnym zniesieniu więzów przestrzennych na rotację. Pozwoliło to m. in. na przestudiowanie efektu anizotropii rozumianego jako zależność oddziaływania atom – cząsteczka dwuatomowa od orientacji przestrzennej tej ostatniej. W szczególności, znaleziono powiązanie między ani-

zotropią potencjału oddziaływania a wzbudzeniem rotacyjnym cząsteczki. Jednoczesne zwiększenie numerycznej dokładności stosowanych potencjałów pozwoliło na odtworzenie wyników eksperymentów zderzeniowych i wskazanie źródeł obserwowanego kształtu niskoenergetycznych struktur rezonansowych. W pracy H4 zaproponowano alternatywną i ogólną, choć obliczeniowo kosztowną, metodę wyznaczania zespolonej powierzchni energii potencjalnej opartą na metodzie stabilizacji, aproksymacji Padégo i przedłużeniu analitycznym na płaszczyznę zespoloną. W następnej pracy (H5), wciąż bazując na AVT, zaprezentowano uproszczoną wersję wyrażenia na stałą szybkości reakcji jonizacji Penninga. Kolejnym sukcesem było uogólnienie metody AVT na atomowe stany o symetrii P . Pozwoliło ono zinterpretować obserwowany w eksperymencie przebieg zależności stałej szybkości jonizacji Penninga od energii zderzeń.

Uwzględnienie efektu niesztynności cząsteczki jako składnika kompleksu zderzeniowego było jeszcze jednym, zakończonym powodzeniem, etapem rozszerzania metody AVT. Poskutkowało to jeszcze lepszym odtworzeniem struktury rezonansowej badanych układów i wyjaśniło przyczyny konieczności stosowanego wcześniej empirycznego skalowania wyników. Ponadto, nowa wersja metody umożliwiła uzyskanie realistycznych wyników w badaniach efektów izotopowych w zderzeniach niskotemperaturowych oraz wprowadziła nową jakość poprzez uwzględnienie wzbudzeń oscylacyjnych.

Przedstawione w cyklu habilitacyjnym wyniki pozwoliły na zrozumienie zachowania się układów atom-cząsteczka w stopniu wystarczającym do uzyskania nad nim kontroli w niskotemperaturowych procesach zderzeniowych. Nie bez znaczenia jest też zaprezentowana moc predykcyjna stworzonej metody, co jest szczególnie cenne z punktu widzenia planowanych eksperymentów.

Na szczególne podkreślenie zasługuje ścisłe połączenie przedstawionych w osiągnięciu habilitacyjnym badań teoretycznych z eksperymentalnymi. Ich wzajemna motywacja i weryfikacja jest nie do przecenienia.

Dołączone do Wniosku oświadczenia Habilitanta oraz współautorów publikacji wchodzących w skład cyklu habilitacyjnego nie pozostawiają wątpliwości, że indywidualny wkład dra Pawłaka w oceniane osiągnięcie naukowe jest znaczący, a w większości przypadków, wręcz wiodący.

Aby ocenić wagę wkładu badań naukowych w rozwój dyscypliny, należy

m. in. zidentyfikować elementy nowości naukowej. W przypadku ocenianego cyklu habilitacyjnego do najważniejszych innowacji zaliczam m. in.

- Opracowanie wariacyjnej teorii adiabatycznej do modelowania zderzeń atom-cząsteczka
- Wskazanie na rolę stanów rotacyjnych cząsteczki w pomiarach struktury rezonansowej
- Wykazanie znaczenia efektów niesztywności cząsteczek w procesie zderzeń niskoenergetycznych
- Obliczenie referencyjnej powierzchni energii potencjalnej dla układu $\text{He}^* + \text{H}_2$

Dr Pawlak prowadząc badania naukowe miał możliwość pracy z wybitnymi naukowcami z dziedziny modelowania zjawisk zderzeniowych. Zdobyte u ich boku kompetencje pozwoliły na wypracowanie własnej, efektywnej metodyki badawczej oraz osiągnięcie samodzielności naukowej w stopniu pozwalającym na prowadzenie własnej grupy badawczej.

Podsumowując, dorobek naukowy Habilitanta oceniam bardzo pozytywnie. W szczególności, dr Mariusz Pawlak posiada w swoim dorobku osiągnięcie naukowe w postaci cyklu ściśle powiązanych tematycznie artykułów naukowych opublikowanych w bardzo dobrych czasopiśmie naukowych o światowym zasięgu. Nie mam wątpliwości, iż osiągnięcie to stanowi znaczny wkład w rozwój nauk chemicznych oraz, że osiągnięcie to jest efektem indywidualnego zaangażowania Habilitanta.

3 Ocena aktywności naukowej realizowanej poza uczelnią macierzystą

Dr Mariusz Pawlak, jeszcze przed doktoratem nawiązał, przy udziale promotora prof. Bylickiego, współpracę z ośrodkami zagranicznymi w Indiach i Izraelu. Kontynuował ją również po uzyskaniu stopnia doktora, a jej owocem było kilka publikacji, w tym te wchodzące w skład cyklu habilitacyjnego. W sumie, po doktoracie dr Pawlak odbył kilkanaście staży naukowych w

instytucjach badawczych Izraela, Węgier, Stanów Zjednoczonych, Indii, Niemiec i Szwecji. Widać, że kontakty zagraniczne Habilitanta są w jego pracy standardem a nie przypadkiem. Jako ilustracja może służyć tu wieloletnia i owocna współpraca z profesorem Moiseyevem z Izraela.

Habilitant wykazuje się również ciągłą aktywnością konferencyjną, zarówno w kraju jak i za granicą. Ma też na swoim koncie kilka wykładów na zaproszenie w ośrodkach zagranicznych oraz kilkanaście na macierzystej uczelni. Regularnie prezentował swoje wyniki na międzynarodowych i krajowych konferencjach, sympozjach i warsztatach naukowych, a także brał czynny udział w ich organizowaniu. Wykazał się aktywną postawą w pozyskiwaniu środków finansowych na badania naukowe – jest laureatem konkursów grantowych Narodowego Centrum Nauki oraz Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego. Potrafił też zdobyć środki finansowe z grantów wewnętrzuczelnianych i był wykonawcą w dwóch projektach międzynarodowych.

Nie unikał również aktywności na polu organizacji nauki – uczestniczył w pracach zespołu oceniającego MNiSW, angażował się w działalność Rady Młodych Naukowców na poziomie ministerialnym i wydziałowym. O uznaniu jakie zdobył sobie w środowisku naukowym mogą świadczyć wielokrotne zaproszenia do recenzowania artykułów dla czasopism naukowych oraz wniosków stypendialnych dla Komisji Fulbrighta. Dr Pawlak może też pochwalić się działalnością popularyzującą naukę – prowadził warsztaty dla uczniów szkół ponadpodstawowych oraz dla szerszej publiczności w ramach Festiwalu Nauki, był też jednym z prowadzących szkołę dla doktorantów z Polski i z zagranicy.

Podsumowując tę część opinii, mogę bez wahania stwierdzić, że Kandydat wykazuje się znaczącą aktywnością naukową realizowaną w więcej niż jednej uczelni, w szczególności w uczelniach zagranicznych, co czyni zadość jednemu z wymagań ustawowych dla nadania mu stopnia doktora habilitowanego.

4 Podsumowanie

Analiza całkowitego dorobku naukowego dr Mariusza Pawlaka, w tym osiągnięcia naukowego w formie cyklu publikacji, oraz jego aktywności naukowej prowadzonej poza macierzystą uczelnią skłania mnie do opinii, iż jest on

badaczem przygotowanym do samodzielnej pracy naukowej, dydaktycznej i organizacyjnej. Sadzę ponadto, że osiągnięcie Habilitanta, jakim jest przedstawiony do oceny cykl oryginalnych publikacji, stanowi znaczny wkład autora w rozwój nauk chemicznych oraz, że w tej dziedzinie Habilitant wykazał się istotną aktywnością naukową. Wniosek dra Mariusza Pawlaka o nadanie mu stopnia doktora habilitowanego oceniam bardzo pozytywnie i twierdzę, że wyczerpuje on wymagania Ustawy w tym zakresie.

J. Komesa