

Uniwersytet Śląski w Katowicach

INSTYTUT CHEMII

40-006 Katowice, Szkolna 9, tel/fax. +48(32)259-99-78, ich.wyinst@us.edu.pl

Prof. dr hab. Monika Musiał

Katowice, 11. marca 2022

**Recenzja osiągnięcia naukowego dr. inż. Mariusza Pawłaka
z tytułowanego "Niskoenergetyczne zderzenia atomów z cząsteczkami
dwuatomowymi" oraz całokształtu dorobku naukowego,**
w związku z postępowaniem habilitacyjnym prowadzonym przez Radę
Dyscypliny Nauki Chemicznej Wydziału Chemii Uniwersytetu Mikołaja
Kopernika w Toruniu.

Dr inż. Mariusz Pawlak ukończył studia wyższe na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu w roku 2004 uzyskując tytuł magistra fizyki technicznej. Praca magisterska została wykonana pod kierunkiem prof. dr. hab. Mirosława Bylickiego. W roku 2012 obronił pracę doktorską zatytułowaną „Stany związane i rezonansowe układów kwantowych w polu elektromagnetycznym oraz w otoczeniu plazmy”, zrealizowaną również pod kierunkiem prof. dr. hab. Mirosława Bylickiego. Od roku 2010 jest zatrudniony na Wydziale Chemii w Zakładzie Chemii Kwantowej (obecna nazwa: Katedra Chemii Kwantowej i Spektroskopii Atomowej) UMK, najpierw na stanowisku asystenta, a w ostatnich czterech latach na stanowisku adiunkta.

Dorobek naukowy dr. inż. Mariusza Pawłaka zamyka się w dwudziestu publikacjach, w tym 15 po doktoracie, zamieszczonych w znakomitych czasopiśmie o łącznym współczynniku wpływu $IF=86,704$ (2170 według punktacji MNiSW). Indeks Hirscha Habilitanta wynosi 10 (wg bazy *Web of Science*), a Jego prace były cytowane 174 razy (wg bazy *Web of Science*, bez autocytowań). Habilitant prezentował wyniki swoich badań na kilkudziesięciu konferencjach naukowych, krajowych i zagranicznych, wygłaszając również wykłady na zaproszenie. Także wielokrotnie przedstawiał wyniki swoich badań na seminariach w odwiedzanych ośrodkach naukowych.

Habilitant był kierownikiem dwóch grantów badawczych finansowanych przez Narodowe Centrum Nauki (*Sonata, Miniatura*) i jednego grantu finansowanego przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego (*Mobilność Plus*). Był także beneficjentem konkursów wewnętrznych na Wydziale Chemii UMK (trzykrotnie) oraz programu *Stypendia dla doktorantów 2008/2009 ZPORR*, administrowanego przez Marszałka Województwa Kujawsko-Pomorskiego. Był również wykonawcą w projekcie finansowanym przez rząd węgierski i Unię Europejską, a także w projekcie realizowanym w ramach bilateralnej współpracy polsko-indyjskiej.

Habilitant odbył jeden długoterminowy staż podoktorski w Izraelu (Technion-Israel Institute of Technology, Haifa) i kilka krótkoterminowych, m.in. w Stanach Zjednoczonych (Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics), w Niemczech (Uniwersytet w Heidelbergu), w Izraelu (Weizmann Institute of Science, Technion-Israel Institute of Technology), w Indiach (Indian Association for the Cultivation of Science), na Węgrzech (University of Debrecen). Dzięki licznym stażom zagranicznym miał możliwość nawiązania szerokiej międzynarodowej współpracy naukowej, czego rezultatem jest szereg prac zrealizowanych w zespołach międzynarodowych. Badania prowadzone w laboratoriach zagranicznych, w zespołach angażujących zarówno teoretyków jak i eksperymentatorów, zaowocowały wartościowymi wynikami, m.in. znakomitą rezultatem takiej współpracy jest praca opublikowana w prestiżowym *Nature Physics*.

Kandydat ma również doświadczenie w działalności recenzenckiej, m.in. brał udział w recenzowaniu wniosków dla Polsko-Amerykańskiej Komisji Fulbrighta, był również członkiem Zespołu Specjalistycznego w Ministerstwie Nauki i Szkolnictwa Wyższego do oceny wniosków o przyznanie środków finansowych na działalność statutową.

Dr inż. Mateusz Pawlak jest laureatem kilku nagród i wyróżnień, m.in. za osiągnięcia uzyskane w dziedzinie naukowo-badawczej (zespołowe wyróżnienie Rektora UMK), za publikacje w wysoko punktowanych czasopiśmie naukowych (nagroda Dziekana Wydziału Chemii UMK), za pozyskiwanie środków w ramach grantów zewnętrznych (nagroda Dziekana Wydziału Chemii UMK). Jest również laureatem programu *TransFormation.doc* realizowanego przez MNiSW.

Ocena osiągnięcia naukowego

Publikacje wchodzące w zakres osiągnięcia naukowego to cykl spójnych tematycznie dziewięciu artykułów. Prace te ukazały się w bardzo dobrych czasopiśmie (po jednej w *Nature Physics*, *Journal of Chemical Physics*, *Journal of Physical Chemistry A*, *Journal of Chemical Physics Letters*, *Journal of Mathematical Chemistry* oraz cztery w *Journal of Chemical Theory and Computation*), których współczynnik wpływu (IF) mieści się w przedziale od 2,4 do 22,7. W sześciu pracach Habilitant jest pierwszym autorem, a w pięciu autorem korespondującym. Do wszystkich prac dołączono stosowne oświadczenia współautorów odnośnie do ich udziału w pracy i z dokumentacji tej wynika istotna rola dr. inż. Mariusza Pawłaka w ich powstawaniu.

Osiągnięcie naukowe Kandydata stanowi opracowanie w ramach mechaniki kwantowej teorii adiabaticznej przeznaczonej do opisu niskoenergetycznych zderzeń atomów z cząsteczkami dwuatomowymi. Nowe podejście zostało zrealizowane w dwóch wariantach: wariacyjnym (AVT) i perturbacyjnym (APT). Nowo opracowana i zaimplementowana metoda została wykorzystana do opisu zderzeń wzbudzonego atomu helu (1s2s oraz 1s2p) z cząsteczką H₂ i jej podstawieniami izotopowymi (HD, D₂). Proces ten znany jest jako jonizacja Penninga i prowadzi do powstania atomu helu w stanie podstawowym, jonu molekularnego H₂⁺ (także HD⁺ lub D₂⁺) oraz wolnego elektronu. Opracowana metoda jest pierwszym udanym podejściem do opisu wspomnianej jonizacji, pozwalającym, m.in. na poprawne wyznaczenie stałych szybkości.

W pracy H1 przedstawiono założenia i podstawowe równania metod AVT i APT. Ich skuteczność przetestowano dokonując obliczeń stałych szybkości jonizacji Penninga dla układu He(1s2s)-HD. Podobne zagadnienia były podejmowane w pracy H3, w której wariacyjna teoria adiabaticzna została uogólniona i sformułowana w postaci wygodnej do implementacji numerycznej i, co ważne, możliwa do zastosowania w badaniach zderzeń atomów z molekułami dwuatomowymi w dowolnym stanie rotacyjnym.

Tak sformułowana teoria umożliwiła badania anizotropii oddziaływania oraz jej wpływu na kształt kwantowej struktury rezonansowej (pozycje H2-H8).

W pracy H4 reakcję dysocjacji Penninga potraktowano jako autojonizację kompleksu ${}^4\text{He}^*(\equiv {}^4\text{He}(1s2s)) + \text{H}_2$. Dla opisu tego procesu skonstruowano zespoloną powierzchnię energii potencjalnej stosując metodę stabilizacji, a w dalszym kroku - aproksymantę Padego. Poszukiwane rezonanse są punktami stacjonarnymi na płaszczyźnie zespolonej. Wykazano, że wariacyjna teoria

adiabatyczna może być z powodzeniem wykorzystana do wyznaczania zespolonej powierzchni energii potencjalnej.

W oparciu o metodę AVT i niezależną od czasu niehermitowską teorię rozpraszania wyprowadzono w pracy H5 nowe i proste wyrażenie na stałą szybkości reakcji jonizacji Penninga. Pokazano m.in., że do jej wyznaczania nie są konieczne informacje o produktach reakcji, a jedynie dane dotyczące podukładów biorących udział w zderzeniach i wzajemnie ich oddziaływania. Nowa formuła została wykorzystana w kolejnych pracach wchodzących w zakres osiągnięcia naukowego (H5-H8)

W pracy H6 przedmiotem badań były zderzenia wzbudzonego atomu helu w stanie $1s2p$ (we wcześniejszych pracach rozważano stan $1s2s$) z cząsteczkami H_2 i HD . M.in. celem obliczeń było wyjaśnienie nieoczekiwanego spadku szybkości reakcji w pobliżu temperatury 1K (powyżej tej temperatury zachowanie się układu poprawnie opisuje klasyczna teoria Langevina). Zastosowanie metody AVT w tym przypadku było trudniejsze (brak symetrii sferycznej orbitalu $2p$), ale wyniki obliczeń potwierdziły w całej rozciągłości obserwowany eksperymentalnie efekt.

W pracy H7 przebadano jak ważne są efekty wynikające z wpływu drgań molekularna niskoenergetyczne rezonanse w zimnych zderzeniach. Wyznaczono bardzo dokładną powierzchnię energii potencjalnej dla układu $^4He^* + H_2$, uwzględniającą efekty nieszywności rotującej cząsteczki. Znajomość tej powierzchni umożliwiła w pracy H8 potwierdzenie na drodze teoretycznej silnego efektu izotopowego obserwowanego w niskoenergetycznych zderzeniach. W pracy tej pokazano, że, poprzez kontrolę stanów rotacyjnych i wibracyjnych cząsteczki, można sterować niskoenergetyczną strukturą rezonansową, czyli wzmacniać lub tłumić stałą szybkości reakcji, co ma istotne znaczenie dla kontrolowania procesów zachodzących w niskich temperaturach.

W pracy H9 przy użyciu zaawansowanego aparatu matematycznego wyprowadzono ogólną postać analityczną elementów macierzowych potencjału oddziaływania atom-cząsteczka dwuatomowa, stosując szereg wielomianów Legendre'a w bazie iloczynów dwóch harmonik sferycznych. Uogólnienie to umożliwiło uwzględnienie kolejnych wyrazów w rozwinięciu potencjału na wielomiany Legendre'a i tym samym na zbadanie ich wpływu na szybkości reakcji.

Chciałabym na końcu zwrócić uwagę na pracę H2, wieloautorową, która przedstawia wyniki doświadczeń skonfrontowane z obliczeniami teoretycznymi. Fakt, że została ona zamieszczona w *Nature Physics* dowodzi atrakcyjności tematyki badawczej reprezentowanej przez Habilitanta oraz przydatno-

ści opracowanej przez niego metody teoretycznej.

Podsumowując moją opinię dotyczącą osiągnięcia naukowego chcę powiedzieć, że jestem pełna uznania dla wyników uzyskanych przez dr. inż. Mariusza Pawlaka. Stworzenie nowej skutecznej metody obliczeniowej, pozwalającej na poprawną interpretację wyników skomplikowanych eksperymentów jest znaczącym osiągnięciem. Dodatkowym walorem tych rezultatów jest fakt, że nowo opracowane metody znajdują zastosowanie w bardzo atrakcyjnej, dynamicznie się rozwijającej dziedzinie badań, związanych z chemią w ultraniskich temperaturach. Rozwijane przez Habilitanta metody teoretyczne bez wątpienia pozwalają na lepsze zrozumienie procesów zachodzących w tych temperaturach.

Chciałabym też rzec kilka ciepłych słów na temat warsztatu badawczego oraz osobistych kompetencji naukowych Habilitanta. Dysponuje on świetnym warsztatem badawczym, znakomicie radzi sobie z zaawansowaną matematyką, ma pełne rozeznanie zarówno w dostępnych czy funkcjonujących w obiegu metodach chemii kwantowej jak i w zasobach metod matematycznych. Prowadząc badania na pograniczu matematyki, fizyki i chemii Habilitant musi posiadać ugruntowaną wiedzę w tych trzech dziedzinach. Do tego należy jeszcze dołożyć biegłość w tworzeniu programów komputerowych. Wysoko oceniam kompetencje i uzdolnienia Habilitanta.

Ocena działalności badawczej Habilitanta niewłączonej do osiągnięcia naukowego.

Badania prowadzone przez Habilitanta przed uzyskaniem stopnia doktora koncentrowały się na badaniu stabilności stanów rezonansowych (a także związanych) w silnych polach. Wyniki badań z tego okresu zamieszczono w pięciu publikacjach.

Tematyka badawcza realizowana poza badaniami wchodzącymi w zakres doktoratu i w zakres osiągnięcia badawczego będącego podstawą niniejszego postępowania, dotyczy również atrakcyjnych i ważnych problemów naukowych. Mam na myśli przede wszystkim prace poświęcone stanom rydbergowskim atomów i jonów, które pozostają niedostępne dla standardowych metod chemii kwantowej. M.in. w pracy P11 wyznaczono energie wysoko wzbudzonych stanów rydbergowskich atomu rubidu, także tych niedostępnych doświadczalnie z powodu ograniczeń aparaturowych. W pracy P12 wykonano obliczenia poziomów energetycznych jonu Ca^+ dla bardzo wysokich wartości głównej liczby kwantowej ($n=64$). Zwróciła moją uwagę także praca

(P10), poświęcona stabilności układów boromejskich (trójcząstkowe układy, rozpadające się po usunięciu dowolnego elementu), w której autorzy, na podstawie własnych obliczeń wariacyjnych z funkcjami jawnie skorelowanymi, modyfikują dotychczasowe zasady odnoszące się do stabilności tychże układów.

Należy przyznać, że badania, prowadzone poza głównym nurtem tematycznym, reprezentują również wysoki poziom naukowy, a ich wyniki opublikowano w poważnych czasopismach (*Phys. Rev A* - 4 prace, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*).

Ocena działalności dydaktycznej, organizacyjnej i popularyzatorskiej

Dr inż. Mariusz Pawlak prowadził szereg zajęć laboratoryjnych oraz ćwiczeń z podstaw chemii kwantowej, chemii teoretycznej, chemii informatycznej, matematyki i matematyki z elementami statystyki, programowania i metod numerycznych, a także z podstaw chemii analitycznej. Był promotorem w czterech pracach licencjackich na kierunku chemia, a także, co warto podkreślić, promotorem pomocniczym w dwóch pracach doktorskich. Brał czynny udział w opracowaniu programu studiów nowej specjalności *chemia informatyczna*.

Habilitant udziela się również w działaniach organizacyjnych, m.in. był członkiem Rady Młodych Naukowców V kadencji w Ministerstwie Nauki i Szkolnictwa Wyższego, członkiem Rady Młodych Wydziału Chemii UMK, jest członkiem priorytetowego zespołu badawczego, który został wyłoniony w konkursie w ramach programu MNiSW „Strategia doskonałości - Uczelnia Badawcza”. Był również członkiem komitetów organizacyjnych konferencji, m.in. *10th Central European Symposium on Theoretical Chemistry*, a obecnie *25th International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology*. Jest również odpowiedzialny za administrowanie infrastrukturą serwerowo-sieciową w Katedrze Chemii Kwantowej i Spektroskopii Atomowej UMK.

Jak widać z powyższego zestawienia Habilitant jest zaangażowany zarówno w działalność organizacyjną jak i dydaktyczną i ten aspekt Jego aktywności oceniam bardzo pozytywnie. Dr inż. Mariusz Pawlak zajmuje się także działalnością popularyzatorską. M.in. prowadził zajęcia w ramach szkoły dla doktorantów z kraju i z zagranicy *Toruń Astrophysics, Spectroscopy and Quantum chemistry school*, współprowadził warsztaty fizyczne dla uczniów

szkół ponadpodstawowych, również, w ramach *Toruńskiego Festiwalu Nauki i Sztuki*.

Podsumowanie

Wniosek dr. inż. Mariusza Pawłaka spełnia wszystkie formalne wymagania Ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce. W szczególności Kandydat: i) posiada stopień doktora ii) nie ubiegał się wcześniej o nadanie stopnia doktora habilitowanego iii) przedstawił cykl powiązanych tematycznie artykułów opublikowanych w czasopiśmie naukowych iiii) wykazał się aktywnością naukową realizowaną poza macierzystą uczelnią.

Biorąc to pod uwagę oraz całość dorobku naukowego i dydaktycznego stwierdzam, że dr. inż. Mariusz Pawlak spełnia bez zastrzeżeń wymagania formalne i merytoryczne wynikające z *Ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* z dnia 20 lipca 2018 roku odnoszące się do prac habilitacyjnych, i w związku z tym wnoszę o dopuszczenie dr. inż. Mariusza Pawłaka do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

Monika Muiat