

Toruń, dn. 02.11.2023

dr hab. Piotr Masłowski, prof. UMK

Instytut Fizyki

Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu

Recenzja osiągnięć habilitacyjnych dr. Tomasza Urbańczyka w związku z postępowaniem o nadanie stopnia doktora habilitowanego.

Zgodnie z informacją otrzymaną od Przewodniczącego Rady Dyscypliny Nauki Fizyczne Uniwersytetu Jagiellońskiego, na posiedzeniu w dniu 22.06.2023 zostałem powołany na członka komisji habilitacyjnej w postępowaniu o nadanie dr. Tomaszowi Urbańczykowi stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne w roli recenzenta. Jednocześnie zostałem poproszony przez Pana Przewodniczącego o przygotowanie recenzji, zgodnie z art. 221 ust. 8 ustawy z dnia 20 lipca 2018 roku Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce.

Dr Tomasz Urbańczyk ukończył studia na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego (UJ) w roku 2009, broniąc pracę magisterską pod tytułem "Oddziaływanie zimnych atomów z powierzchnią dielektryczną w dipolowym lustrze optycznym". Stopień doktora nauk fizycznych uzyskał w roku 2015, broniąc na wyżej wymienionym Wydziale pracę doktorską zatytułowaną „Spektroskopia dimerów w wiązce naddźwiękowej - w kierunku kwantowego splątania atomów”. Promotorem pracy był prof. dr hab. Jarosław Koperski.

Habilitant w roku 2014 został zatrudniony w Instytucie Fizyki im. Mariana Smoluchowskiego UJ na stanowisku fizyka, początkowo w ramach projektu CENILS (Central European Network for knowledge based on Innovative Light Sources). W okresie V 2016 – VIII 2019 był zatrudniony na etacie asystenta w Instytucie Fizyki UJ ramach projektu NCN OPUS 9 pt. „Nowe eksploracje wiązań w dwuatomowych molekułach van der Waalsa: wysokorozdzielcza spektroskopia rotacyjna a zaawansowane obliczenia *ab initio* – w poszukiwaniu źródeł rozbieżności”. W listopadzie 2019 roku został zatrudniony na stanowisku specjalisty w Instytucie Fizyki UJ, a od października 2020 roku jest zatrudniony na stanowisku adiunkta w tym samym Instytucie.

Opinia o przedstawionych osiągnięciach habilitacyjnych.

Dr Tomasz Urbańczyk jak swoje osiągnięcia habilitacyjne przedstawił dwa cykle artykułów naukowych :

- cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych zatytułowany „Badania spektroskopowe oraz analizy widm dwuatomowych molekuł van der Waalsa zawierających atom kadmu”
- cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych zatytułowany „Metody wyznaczania potencjałów molekularnych na podstawie widm eksperymentalnych za pomocą algorytmów wykorzystujących techniki sztucznej inteligencji”.

Na pierwsze z przedstawionych osiągnięć składa się 12 artykułów naukowych, opublikowanych w uznanych czasopismach o zasięgu międzynarodowym: Chemical Physics Letters (trzy artykuły), Spectrochimica Acta A (cztery artykuły), Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, International Reviews in Physical Chemistry, Molecular Physics, Physical Review A i Physics Reports. Jedenaście z artykułów składających się na pierwszy cykl zostało opublikowanych po uzyskaniu stopnia doktora. Wszystkie publikacje składające się na przedstawiony cykl są współautorskie, z deklaracji habilitanta oraz załączonych oświadczeń współautorów wynika, że wkład habilitanta był co najmniej istotny.

Tematem przedstawionego cyklu są, zgodnie z tytułem, badania i analiza widm dwuatomowych molekuł van der Waalsa zawierających atom kadmu. Głównym celem prowadzonych badań jest weryfikacja eksperymentalna obliczeń teoretycznych potencjałów oddziaływania badanych molekuł. Dzięki porównaniu stałych molekularnych otrzymanych na podstawie analizy danych doświadczalnych z obliczeniami *ab initio* możliwa jest weryfikacja tych obliczeń i wprowadzenie poprawek. Badania prowadzone na przykładzie molekuł dwuatomowych pozwalają na lepsze zrozumienie tego typu oddziaływań w wielu układach molekularnych, także w większych molekułach. Ma to duże znaczenie w wielu obszarach badań, m.in. w inżynierii materiałowej, biochemii, a także, na podstawie badań z ostatnich lat, dla wytwarzania i badania ultra-zimnych molekuł czy metrologii częstotliwości

Część doświadczalna eksperymentu była prowadzona przy użyciu układu wyposażonego w impulsowy generator ultradźwiękowej wiązki molekularnej. Dzięki jego wykorzystaniu możliwe jest wytworzenie prostych cząsteczek dwuatomowych w najniższym W prowadzonych eksperymentach wytworzone molekuły były następnie wzbudzone przy pomocy odpowiednio dostrojonego spektralnie światła laserowego do wyższych stanów elektronowych i rejestrowany był sygnał laserowo indukowanej fluorescencji (z j. ang. *laser induced fluorescence* - LIF). Oprócz bezpośredniego wzbudzenia jednofotonowego w badaniach wykorzystana została także technika podwójnego rezonansu optyczno-optycznego (z j. ang. *optical-optical double resonance* – OODR). Pozwala ona na próbkowanie stanów wysoko wzbudzonych, w tym także nisko położonych stanów Rydbergowskich przy wykorzystaniu komercyjnie dostępnych laserów z możliwością precyzyjnego przestrajania, jak i badanie stanów które nie mogą zostać wzbudzone bezpośrednio (jednofotonowo).

Pozwolę sobie pominąć szczegółową analizę wyników otrzymanych w pracach wchodzących w skład osiągnięcia, niemniej postaram się podsumować najważniejsze osiągnięcia naukowe przedstawione w pierwszym z przedstawionych cykli publikacji. Należą do nich:

- 1) po raz pierwszy częściowe rozdzielenie struktury rotacyjnej przejścia  $B^31(5^3P_1) \leftarrow X^10^+(5^1S_0)$  w układów CdAr i CdNe i wyznaczenie dokładniejszych wartości stałych oscylacyjnych dla poziomu  $B^31(5^3P_1)$  dla obserwowanych poziomów rotacyjnych
- 2) zastosowanie metody OODR do zbadania po raz pierwszy stanu o symetrii gerade w molekułce Cd<sub>2</sub>, który później został zidentyfikowany jako  $^31_g(6^3S_1)$  Badanie tego stanu nie byłoby możliwe przy bezpośrednim wzbudzeniu jednofotonowym.
- 3) pomiary widm cząsteczek CdAr, CdKr z wykorzystaniem selektywnego wzbudzenia izotopologów oraz cząsteczki CdNe z wykorzystaniem selektywnego wzbudzenia wybranych poziomów rotacyjnych, co ułatwiło analizę danych i dokładne wyznaczenie stałych molekularnych. Pomiary tego typu były możliwe dzięki wykorzystaniu techniki OODR.
- 4) zaproponowanie schematu chłodzenia molekuł Cd<sub>2</sub> bazującego na schemacie Walthera wprowadzonym dla cząsteczek Hg<sub>2</sub>. Rozszerzenie zaproponowanego schematu do wersji



umożliwiającej chłodzenie oscylacyjno-rotacyjne molekuł  $Cd_2$  i stworzenie modelu takiego chłodzenia, pozwalającego ocenić jego efektywność.

5) systematyczne, obszerne i szczegółowe porównanie potencjałów teoretycznych i doświadczalnych dla molekuł  $Cd_2$  i  $CdAr$  uzupełnione nowymi obliczeniami teoretycznymi potencjałów oddziaływania dla tych układów.

Należy podkreślić, że zaprezentowany w opisywanym cyklu artykułów dorobek jest bardzo obszerny. Jego uzyskanie wymagało zarówno wiedzy i umiejętności eksperymentalnych jak i znajomości teorii fizyki molekularnej. Część eksperymentalna przedstawionych bazuje na aparaturze światowej klasy, a przeprowadzone pomiary, bazujące na wiązce molekularnej o dobrze określonych właściwościach i laserach pracujących na dł. fali poniżej 400 nm są po prostu trudne w realizacji. Uzyskane wyniki są niezmiernie ważne, ze względu na możliwość weryfikacji obliczeń teoretycznych.

Pewne zdziwienie budzi jedynie małe upowszechnienie otrzymywanych wyników – ogólna liczba cytowań cyklu, określona przez habilitanta, wynosi 56. Wskazuje to na potrzebę szerszego rozpowszechnienia uzyskanych wyników i być może lepsze umieszczenie ich w kontekście aktualnie prowadzonych przez środowisko badań. Z całą pewnością wpływ na to miała stosunkowo mała liczba wystąpień konferencyjnych, zwłaszcza poza granicami kraju. Chciałbym zwrócić także uwagę, przyjmując argument habilitanta o podobieństwie układów  $Cd_2$  i  $Hg_2$ , że praca [A12] zatytułowana *Interatomic potentials of the heavy van der Waals dimer  $Hg_2$ : A "test-bed" for theory-to-experiment agreement* w mojej opinii nie powinna być włączona do przedstawionego cyklu, ponieważ badania w niej opisane nie dotyczą molekuł zawierających atom kadmu, a na taki zakres tematyczny wskazuje tytuł osiągnięcia.

Tym niemniej, niezależnie od dwóch ostatnich uwag, w mojej ocenie cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych pt. „Badania spektroskopowe oraz analizy widm dwuatomowych molekuł van der Waalsa zawierających atom kadmu” i przedstawione w nim osiągnięcia bez wątpienia stanowią znaczny wkład w rozwój dyscypliny nauki fizyczne.

Dodatkowo, oprócz cyklu głównego, autor przedstawia także do oceny jednotematyczny cykl publikacji zatytułowany „Metody wyznaczania potencjałów molekularnych na podstawie widm eksperymentalnych za pomocą algorytmów wykorzystujących techniki sztucznej inteligencji”. W artykułach tych habilitant proponuje wykorzystanie metod opartych na sieciach neuronowych i algorytmach genetycznych. Cykl ten składa się z pięciu publikacji, które ukazały się w latach 2016- 2022 w międzynarodowych czasopismach naukowych takich jak *Journal of Molecular Spectroscopy*, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, *Molecular Simulations* i *Acta Physica Polonica A*. I tak w pierwszej pracy habilitant pochyła się nad problemem wyznaczenia potencjałów molekularnych przy wykorzystaniu metody IPA w przypadku widm jedynie częściowo rozdzielonej spektralnie struktury rotacyjnej. Pokazano w niej, że nawet w takich przypadkach możliwe jest wyznaczenie parametrów potencjału z dokładnością rzędu promili. Opisane w tej pracy podejście nie wykorzystywało w żaden sposób technik opartych na sztucznej inteligencji, co zostało zaprezentowane w kolejnych pracach. I tak w pracy B2 zaproponowano wykorzystanie sieci neuronowych do wyznaczenia potencjałów molekularnych Lennarda-Jonesa i cztero- i pięcioparametrowego potencjału EMO dla potencjału stanu  $B^1\Delta_u$  cząsteczki  $Cd_2$  i na podstawie symulacji wykazano, że uzyskane widmo bazujące na potencjale wyznaczone przy pomocy sieci neuronowych są bliższe rezultatom eksperymentalnym niż wyznaczone z potencjału uzyskanego metodą IPA. W pracach B3 i B4, które opublikowano wspólnie z grupą prof. Marka Krośnickiego z Uniwersytetu Gdańskiego, rozwinięto zaproponowane podejście. W pierwszej z nich wykorzystano głęboką sieć neuronową (DNN) wyznaczenia potencjału stanu  $X_2\Sigma^+$  w molekuł  $MgF$  na podstawie

widma rotacyjno-oscylacyjnego. Porównanie uzyskanych wyników dla różnych metod wyznaczenia potencjału pozwala stwierdzić, że w tym przypadku dokładność uzyskanych przy pomocy głębokiej sieci neuronowej wyników jest lepsza w porównaniu do płytkiej sieci neuronowej, natomiast najbardziej dokładna jest metoda DPF (*Direct Potential Fit*). Za użyciem metody DNN przemawia szybszy czas obliczeń, co ma jednak cenę w postaci czasu koniecznego na wytrenowanie sieci. W drugiej wspólnej z Uniwersytetem Gdańskim pracy użyto głęboką sieć neuronową do wyznaczenia potencjału przejścia  $G0_u^+(6^1P_1) (v' = 39) \rightarrow X0_g^+$  w cząsteczce  $Hg_2$  na podstawie przejść *bound*-> *free*. Porównanie widm symulowanych na podstawie parametrów uzyskanych przy pomocy sieci neuronowych z danymi eksperymentalnymi wykazuje dobrą zgodność, jednak ocenę skuteczności metody utrudnia wpływ przejść *boud*-> *bound* na zarejestrowane widmo eksperymentalne oraz różne ustawienia spektrometru dla różnych części widma. W pracy B5 habilitant zastosował algorytm genetyczny do wyznaczenia parametrów potencjału EMO zarówno z symulowanych widm oscylacyjno-rotacyjnych oraz do wyznaczenia parametrów potencjału na podstawie wyników eksperymentalnych dla molekuł CdKr i CdAr. W przypadku danych symulowanych, algorytm genetyczny pozwolił z dużą dokładnością (na poziomie procenta lub mniej) odtworzyć parametry potencjałów, także wykazując dużą dokładność w przypadku niekompletnych widm. A w przypadku porównania z widmami eksperymentalnymi, uzyskano dobrą zgodność, ograniczoną formą dopasowywanego potencjału.

Wg mojej oceny włączenie do warsztatu spektroskopowego technik sztucznej inteligencji jest wartościowym wkładem w rozwój spektroskopii i fizyki molekularnej, pozwalającym wyznaczyć parametry potencjałów oddziaływania. Jak sam habilitant pisze w swoich pracach, istnieje wiele przykładów zastosowania technik do rozwiązywania problemów w spektroskopii molekularnej. (patrz wstępy do prac B3, B5). Jednak w tym zastosowaniu są to pierwsze przykłady ich użycia i wykazują one użyteczność tych technik, m.in. jako niezależna weryfikacja wyników uzyskanych tradycyjnymi metodami lub jako pierwszy krok wstępny w metodzie IPA (co zostało zaproponowane m.in. w pracy B5) Muszę jednak znowu zauważyć, że uniwersalność badań przedstawionych w tym cyklu i zasięg upowszechnienia ich wyników są ograniczone. Jest to potwierdzone małą liczbą ich cytowań (na dzień 01.09.2023 wg Web of Science wynosiła ona 9, a nie uwzględniając autocytowań: 4). Wskazuje to jeszcze bardziej niż w przypadku pierwszego cyklu na potrzebę szerszej współpracy ze środowiskiem z w dalszej karierze naukowej oraz szerszego upowszechniania uzyskiwanych wyników badań.

Podsumowanie i wniosek końcowy.

Podsumowując przedstawioną wyżej recenzję w związku z postępowaniem habilitacyjnym dr. Tomasza Urbańczyka prowadzonym przez Radę Dyscypliny Nauki Fizyczne Uniwersytetu Jagiellońskiego stwierdzam, że przedstawione osiągnięcia naukowe stanowią znaczny wkład w rozwój dyscypliny nauki fizyczne. Stwierdzam także, że przedstawione dwa jednotematyczne cykle publikacji są oparte na publikacjach spełniających warunki określone w art. 219 ust. 1 pkt 2 lit. b ustawy z dnia 20 lipca 2018 roku Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce i w odpowiednich przepisach przejściowych.

*Mastowski*