



Toruń, 22.08.2023

Recenzja w postępowaniu habilitacyjnym pana dr. Tomasza Urbańczyka

Pan dr Tomasz Urbańczyk jako osiągnięcie naukowe w postępowaniu o nadanie stopnia doktora habilitowanego przedstawił cykl powiązanych tematycznie 17 artykułów naukowych jego współautorstwa. Wszystkie te prace poświęcone są badaniom prostych dwuatomowych molekuł van der Waalsa. Silną stroną zaprezentowanego osiągnięcia jest fakt, że dr Tomasz Urbańczyk wniósł istotny wkład zarówno w części teoretycznej jak i eksperymentalnej.

Prace [A1] i [A2] referują wyniki dla metody pojedynczego wzbudzenia. W pracach tych molekuly Cd-Ar [A1] oraz Cd-Ne [A2] są wprost wzbudzane z podstawowego stanu elektronowego $X^{10+}(5^1S_0)$ do stanu elektronowego $B^31(5^3P_1)$. Wzbudzenie następowało z podstawowego stanu wibracyjnego do różnych stanów wibracyjnych. Detekcję realizowano przez pomiar fluorescencji indukowanej laserem. Dzięki zastosowaniu układu laserowego o relatywnie małej szerokości (na poziomie kilku GHz) zdołano częściowo rozdzielić strukturę rotacyjną. Konkretnym i ważnym wynikiem fizycznym tych dwóch prac jest wyznaczenie nowych stałych oscylacyjnych i rotacyjnych dla stanu elektronowego $B^31(5^3P_1)$ dla obu kompleksów Cd-Ar oraz Cd-Ne. W tym miejscu należy odnotować, że pan dr Tomasz Urbańczyk (poza prowadzeniem samych pomiarów) wniósł istotny wkład w budowę i uruchomienie dwóch najważniejszych części układu eksperymentalnego, tj.: 1) skomplikowanego systemu laserowego składającego się z lasera impulsowego (nanosekundowego) dużej mocy pełniącego rolę pompy, lasera barwnikowego oraz odpowiedniego układu mieszania/powielania częstości, 2) układu próżniowego i układu wytwarzania wiązki molekularnej (w szczególności opracowanie impulsowego źródła naddźwiękowej wiązki molekularnej) oraz systemu detekcji fluorescencji. Uwaga ta dotyczy wszystkich prac eksperymentalnych przedstawionych w niniejszym osiągnięciu.

W kolejnych pracach [A3]-[A8] pan dr Tomasz Urbańczyk rozszerzył dotychczasowe badania poprzez zastosowanie dużo bardziej skomplikowanej techniki laserowej (tym razem aż dwa systemy laserów barwnikowych) umożliwiającej realizację spektroskopii podwójnego rezonansu optyczno-optycznego. Metoda ta posiada szereg zalet umożliwiających badania niedostępne przy użyciu prostego pojedynczego wzbudzenia. Np. w przedstawionych tu pracach dr Tomasz Urbańczyk pokazuje przykład dwóch stanów elektronowych molekuly Cd-Ar których minima są odległe od siebie tak bardzo, że przekrycie rotacyjno-wibracyjnych funkcji falowych jest pomijalnie małe i w konsekwencji niezwykle trudno indukować przejście między nimi używając pojedynczego wzbudzenia. Jednak jeśli wykorzystać podwójny rezonans optyczno-optyczny wówczas można dobrać stan pośredni posiadający znaczne przekrycie funkcji falowych zarówno ze stanem podstawowym jak i wzbudzonym i efektywnie realizować wzbudzenie. Inną ważną zaletą metody podwójnego rezonansu jest inny zestaw (w porównaniu do pojedynczego wzbudzenia) reguł wyboru dla molekuł homoatomowych związanych z symetriasami *gerade/ungerade*. W pracy [A3] pan dr Tomasz Urbańczyk wykorzystał tę własność do zbadania po raz pierwszy stanu elektronowego $^31_g(6^3S_1)$ dimeru homoatomowego Cd₂ indukując podwójny rezonans między dwoma stanami *gerade*. Ważnym osiągnięciem pracy [A3] jest zrekonstruowanie ww. stanu elektronowego (krzywej energii w funkcji



odległości atomów Cd) z uzyskanego widma wibracyjno-rotacyjnego. W pracy [A4] dr Tomasz Urbańczyk wykorzystał metodę podwójnego rezonansu optyczno-optycznego do dokładnego wyznaczenia wartości promienia równowagowego dla zewnętrznej studni potencjału stanu $E^3\Sigma_1^+$ molekuly Cd-Ar. Badania te zostały rozszerzone w pracy [A5] o przejścia do stanów niezwiązanych (bound-free). W pracach [A6] i [A7] pan dr Tomasz Urbańczyk wykorzystał technikę podwójnego rezonansu optyczno-optycznego do selektywnego wzbudzenia tylko jednego izotopologu Cd-Ar, co rozwiązuje problem pomiaru nakładających się widm pochodzących od różnych izotopologów. W pracy [A8] pan dr Tomasz Urbańczyk wykorzystał podobne podejście do selektywnego wzbudzania poziomów rotacyjnych stanu wzbudzonego, co umożliwiło mu wyznaczenie stałych rotacyjnych wzbudzonego stanu elektronowego. W pracach [A9] - [A12] pan dr Tomasz Urbańczyk wraz ze współautorami dokonali przeglądu wyników teoretycznych i eksperymentalnych dla dimeru Cd₂, przeanalizowali schemat chłodzenia dla molekuł Cd₂ i Yb₂ oraz przedstawili wyniki dla molekuly Hg₂.

W pracach [B1] – [B5] przedstawiono wykorzystanie metod sztucznej inteligencji do wyznaczania potencjałów oddziaływania dla kompleksów kadmu z danych spektroskopowych. W pracach [B1] i [B2] szereg symulacji widm dla różnych wariacji potencjałów wykorzystano do wygenerowania danych do uczenia sieci neuronowych które w kolejnym kroku zostały wykorzystane do odtworzenia potencjału oddziaływania w oparciu o widma eksperymentalne. Ważnym wynikiem było pokazanie, że wykorzystanie sieci neuronowych dało lepszą zgodność z eksperymentem niż wcześniej wykorzystana metoda *Inverse Perturbation Approach*. W pracy [B3] wykorzystano głębokie sieci neuronowe do wyznaczenia potencjału podstawowego stanu elektronowego molekuly MgF wykorzystując dane eksperymentalne dostępne w literaturze. W pracy [B4] wykorzystano sieci neuronowe do wyznaczenia potencjału podstawowego stanu elektronowego (odpychającej części) molekuly Hg₂. W ostatniej pracy [B5] przedstawionej w ramach zgłoszonego osiągnięcia użyto algorytmów genetycznych do wyznaczenia potencjału oddziaływania dla molekuł CdAr i CdKr.

Z załączonych do wniosku habilitacyjnego oświadczeń jasno wynika, że indywidualny wkład pana dr. Tomasza Urbańczyka do przedstawionych w ramach osiągnięcia prac był istotny, a dla wielu z nich wręcz dominujący; dr Tomasz Urbańczyk w większości prac nie tylko przeprowadził pomiary (wcześniej budując układ eksperymentalny) ale też przeprowadził analizę danych i symulację widm. W kilku przypadkach był pomysłodawcą całej idei na której zasadał się artykuł naukowy, co świadczy o jego samodzielności naukowej. W mojej opinii wkład dr. Tomasza Urbańczyka jest ponad wszelką rozsądną wątpliwość wystarczający aby przedstawić te artykuły jako jego osiągnięcie habilitacyjne.

Przedstawione osiągnięcie (wyżej opisany cykl publikacji [A1]-[A12], [B1]-[B5]) stanowi, w mojej ocenie, znaczny wkład w rozwój dyscypliny. Osiągnięcie to przedstawia szereg wyników ważnych dla rozwoju fizyki molekularnej; zaportowano nowe lub dokładniejsze wartości stałych rotacyjnych i wibracyjnych oraz potencjały dla kilku stanów elektronowych kilku molekuł. Rozwinięto metodologię spektroskopii w wiązkach molekularnych (w tym problem konstrukcji impulsowego źródła związków kadmu). Poza tym zademonstrował on możliwości wykorzystania metod sztucznej inteligencji do rekonstruowania potencjałów międzyatomowych. Kolejnym przykładem ciekawego i ważnego wkładu w dyscyplinę jest przeanalizowanie możliwości chłodzenia rotacyjno-oscylacyjnego dla molekuł Cd₂ i Yb₂.

Słabą stroną dorobku jest fakt, że wszystkie przedstawione we wniosku publikacje są zrealizowane we współpracy z promotorem doktoratu dr. Tomasza Urbańczyka oraz fakt, że nie kierował swoim grantem badawczym. Podobnie liczba referatów konferencyjnych i współpraca międzynarodowa jest relatywnie mała jak na ten etap kariery naukowej. Niemniej, z przedstawionej

dokumentacji wyniki, że pan dr Tomasz Urbańczyk swoją istotną działalność naukową prowadził w więcej niż jednej uczelni (w tym zagranicznej) co czyni zadość wymogom ustawowym.

Podsumowując stwierdzam, że przedstawione osiągnięcie spełnia ustawowe oraz zwyczajowe wymagania stawiane w przewodach habilitacyjnych. Wnoszę o dopuszczenie do dalszych kroków postępowania i nadanie doktorowi Tomaszowi Urbańczykowi stopnia doktora habilitowanego.

A handwritten signature in blue ink, reading 'Piotr Wcisło'.

dr hab. Piotr Wcisło, prof. UMK
Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej
Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu