



Dr hab. Rafał Hakalla, prof. UR

Rzeszów, dnia 18.08.2023

Ocena osiągnięć naukowych
stanowiących dwa cykle powiązanych tematycznie artykułów pt.
„Badania spektroskopowe oraz analizy widm dwuatomowych molekuł van der Waalsa
zawierających atom kadmu” (osiągnięcie główne) oraz „Metody wyznaczania potencjałów
molekularnych na podstawie widm eksperymentalnych za pomocą algorytmów
wykorzystujących techniki sztucznej inteligencji”,
a także pozostałej aktywności naukowej Pana dr. Tomasza Urbańczyka

1. Przebieg kariery zawodowej

Pan dr Tomasz Urbańczyk ukończył studia magisterskie w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie w roku 2009. W 2015 r. obronił rozprawę pt. „Spektroskopia dimerów w wiązce naddźwiękowej - w kierunku kwantowego splątania atomów” uzyskując stopień naukowy doktora nauk fizycznych w zakresie fizyki nadany uchwałą Rady Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UJ. Promotorem dysertacji był prof. dr hab. Jarosław Koperski.

W początkowej fazie swojej kariery naukowej, Habilitant był zatrudniany okresowo na etacie specjalisty/samodzielnego fizyka w Instytucie Fizyki UJ w ramach projektu CENILS (*Central European Network for knowledge based on Innovative Light Sources*)(I-XII 2014 oraz III 2015 - IV 2016 r.) Kolejne etapy kariery przyniosły zatrudnienie w latach 2016 - 2019 na etacie asystenta w Instytucie Fizyki UJ w 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”, a następnie w latach 2019 - 2020 na stanowisku specjalisty w tej samej jednostce. Wreszcie od października 2020 roku Kandydat został zatrudniony na stanowisku adiunkta w Instytucie Fizyki UJ, gdzie pracuje w tym charakterze do dnia dzisiejszego.

2. Ocena osiągnięć naukowych

Zainteresowania naukowe pana dr. Tomasza Urbańczyka koncentrowały się głównie wokół rejestracji oraz analizy widm spektralnych dwuatomowych molekuł van der Waalsa zawierających atom kadmu (12. grupa układu okresowego). Motywacją była chęć eksperymentalnej weryfikacji przewidywań teoretycznych (*ab initio*) dotyczących potencjałów elektronowych badanych molekuł dwuatomowych. Kolejnym nurtem zainteresowań Habilitanta stała się tematyka sięgająca swymi korzeniami jeszcze jego studiów doktoranckich, a mianowicie próba opracowania nowych metod wyznaczania potencjałów na podstawie widm eksperymentalnych. Innowacyjność tych metod miała polegać głównie na wykorzystywaniu do tego celu technik sztucznej inteligencji, takiej jak sieci neuronowe (w tym sieci głębokie), a także algorytmów genetycznych. Ich konfrontacja z najlepszymi metodami stosowanymi do tej pory w spektroskopii miała przynieść odpowiedź na temat ich znaczenia dla fizyki molekularnej.

Hakalla

W celu osiągnięcia zmierzonych celów naukowych, Kandydat m.in. nawiązał bardzo dynamiczną współpracę z grupami naukowymi o międzynarodowej renomie, a mianowicie z Uniwersytetem Wiedeńskim (prof. Markus Arndt), Uniwersytetem Sofijskim (prof. Asen Pashov), Uniwersytetem Gdańskim (prof. Marek Krośnicki) oraz Uniwersytetem Mikołaja Kopernika w Toruniu (prof. Andrzej Kędzierski), tworzącymi zarówno nowatorskie narzędzia eksperymentalne jak i teoretyczne walidowane przez eksperyment i tym samym umożliwiające konstruowanie coraz dokładniejszych modeli molekuł dwuatomowych, w tym van der Waalsa.

Przedstawione przez Habilitanta osiągnięcia naukowe stanowią dwa cykle powiązanych tematycznie artykułów stanowiących podstawę do ubiegania się o stopień doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne. Pierwsze z osiągnięć pt. „*Badania spektroskopowe oraz analizy widm dwuatomowych molekuł van der Waalsa zawierających atom kadmu*”, będące głównym dokonaniem Kandydata, opiera się o jednotematyczny cykl dwunastu oryginalnych prac wieloautorskich [A1-A12], z których jedenaście [A2-A12] opublikowanych zostało po uzyskaniu stopnia doktora nauk fizycznych w renomowanych czasopismach z listy JCR o zasięgu globalnym: *Spectrochimica Acta A* (4), *Chemical Physics Letters* (3), *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* (1), *International Reviews in Physical Chemistry* (1), *Molecular Physics* (1), *Physical Review A* (1) oraz *Physics Reports* (1). W dziewięciu pracach [A1-4, A6-10] pan dr Tomasz Urbańczyk jest pierwszym autorem, w jednej [A5] występuje jako drugi autor, a w kolejnych dwóch jako trzeci publikujący [A11-12]. W czterech pracach [A2, A6, A7, A8] jest także autorem korespondencyjnym. W dziesięciu publikacjach [A1-10] odgrywa on wiodącą rolę, a w pozostałych [A11-12] jest jednym z głównych autorów, co jednoznacznie wynika z przedłożonej dokumentacji wraz z oświadczeniami współautorów. Drugie z osiągnięć pana dr. Tomasza Urbańczyka, pt. „*Metody wyznaczania potencjałów molekularnych na podstawie widm eksperymentalnych za pomocą algorytmów wykorzystujących techniki sztucznej inteligencji*”, opiera się o jednotematyczny cykl pięciu oryginalnych prac wieloautorskich [B1-B5], z których wszystkie opublikowane zostały po uzyskaniu stopnia doktora nauk fizycznych w renomowanych czasopismach z listy JCR: *Spectrochimica Acta A* (1), *Journal of Molecular Spectroscopy* (1), *Molecular Simulation* (2) oraz *Acta Physica Polonica A* (1). W trzech pracach [B1-2, B5] Habilitant jest pierwszym autorem, w jednej z nich [B3] występuje jako trzeci autor, a w [B4] jako ostatni. W trzech pracach [B1-2, B4] jest także autorem korespondencyjnym. W trzech publikacjach [B1-2, B5] odgrywa on zdecydowanie wiodącą rolę, a w pozostałych [B3-4] jest jednym z głównych autorów, co wynika z przedłożonej dokumentacji wraz z oświadczeniami współautorów tych artykułów.

Badanie właściwości bardzo słabych oddziaływań van der Waalsa oraz opracowywanie precyzyjnych metod ich symulacji jest niezwykle istotne, gdyż te, niepozorne na pierwszy rzut oka oddziaływania, odgrywają doniosłą rolę w wielu kluczowych procesach analizowanych interdyscyplinarnie przez różne dziedziny nauki, w szczególności przez inżynierię materiałową (złożone systemy molekularne) oraz biochemię (wpływ na oddziaływania antyciał z antygenami oraz na strukturę DNA). Z drugiej strony, weryfikacja modeli teoretycznych tych oddziaływań jest również nie do przecenienia, gdyż stanowi wskazówkę dla metod *ab initio* pod kątem m.in. udoskonalania stosowanych baz. Molekuły van der Waalsa bardzo dobrze nadają się do takiej weryfikacji z uwagi na to, że są one bardzo proste, a siły jakie je spajają w wielu przypadkach pochodzą jedynie od tych oddziaływań. Okazuje się także, iż modele oparte o algorytmy właściwe dla sztucznej inteligencji lub sieci neuronowych są w stanie szybciej i dokładniej wygenerować potencjały elektronowe (niż tradycyjne metody np. IPA, RKR lub EMO), dla których wysymulowane energie stanów związanych są zaskakująco zgodne z wynikami eksperymentalnymi. Metody te stają się więc także naturalnym prekursorem opracowania precyzyjnych potencjałów molekuł wieloatomowych.

Prace badawcze pana dr. Tomasza Urbańczyka skoncentrowały się na udoskonaleniu układów eksperymentalnych do wytwarzania dimerów w naddźwiękowej wiązce molekularnej (LIF, OODR) oraz poszukiwaniu nowatorskich modeli związanych głównie z dwuatomowymi molekułami van der Waalsa. Na najważniejsze osiągnięcia Habilitanta w tej dziedzinie składają się w szczególności:

Holowo

- opracowanie metody, która pozwala w systematyczny sposób wyznaczyć optymalną wartość promienia równowagowego na podstawie analizy rozkładu natężeń składowych oscylacyjnych w widmach wzbudzenia [A4];
- opracowanie reprezentacji potencjału w pobliżu bariery [A5];
- opracowanie techniki selektywnego wzbudzania wybranych izotopologów molekuł CdRg z wykorzystaniem metody OODR (*optical-optical double resonance*) [A6-7];
- opracowanie metody wzbudzania pojedynczych poziomów rotacyjnych molekuły CdNe z wykorzystaniem metody OODR [A8];
- opracowanie metody wyznaczania stałych rotacyjnych na podstawie obserwowanych widm eksperymentalnych (wynika to z możliwości selektywnego wzbudzania wybranych poziomów rotacyjnych w stanie pośrednim, dzięki czemu możliwe jest precyzyjne, eksperymentalne wyznaczenie wartości stałych rotacyjnych w stanie końcowym) [A8];
- opracowanie alternatywnego sposobu odtwarzania potencjału molekularnego na podstawie widma doświadczalnego z wykorzystaniem sieci neuronowej [B2];
- odpowiednie przygotowanie danych do uczenia sieci neuronowej [B3-4];
- pomysł i opracowanie użycia algorytmu genetycznego do wyznaczenia parametrów potencjału elektronowego [B5].

Przedstawione osiągnięcia naukowe pana dr. Tomasza Urbańczyka, opisane w artykułach [A1-A12] oraz [B1-B5], są w mojej ocenie wybitne i wnoszą znaczący wkład w rozwój spektroskopii molekularnej, a tym samym nauk fizycznych.

3. Ocena pozostałej aktywności naukowej

Na całkowity dorobek publikacyjny Habilitanta składają się 32 prace. Wszystkie opublikowano w renomowanych czasopismach o zasięgu globalnym, indeksowanych w wykazie JCR. W 21. z nich Kandydat jest pierwszym autorem. 10 z wymienionych publikacji ukazało się przed uzyskaniem stopnia doktora, a pozostałe 22 po tym fakcie. 17 zostało przedstawionych jako, omówione powyżej, osiągnięcia naukowe stanowiące podstawę postępowania habilitacyjnego Kandydata.

Wyniki tych publikacji Habilitant zaprezentował na kilkunastu międzynarodowych konferencjach naukowych, organizowanych zarówno w kraju jak i za granicą. W ramach tych wydarzeń kandydat 6 razy wystąpił z komunikatem ustnym (3 razy po doktoracie), co uważam za znaczącą aktywność na polu popularyzacji swoich dokonań naukowych na forum specjalistów spektroskopii molekularnej.

Habilitant został doceniony także poprzez ustanowienie go recenzentem trzech prac w międzynarodowych czasopismach z listy JCR, m.in. *Scientific Reports* oraz *Chemical Physics Letters*.

Pan dr Tomasz Urbańczyk był zaangażowany w 8 projektów (4 po doktoracie) uzyskanych na drodze konkursów krajowych lub zagranicznych. Dwa z nich są obecnie w trakcie realizacji.

Osiągnięciem Kandydata pozostaje pełna sukcesów współpraca z uznanymi grupami badawczymi zajmującymi się zarówno doświadczalną jak i teoretyczną spektroskopią molekularną. Należą do nich, wspomniane w poprzednim rozdziale Oceny, Uniwersytet Wiedeński (prof. Markus Arndt), Uniwersytet Sofijski (prof. Asen Pashov), Uniwersytet Gdański (prof. Marek Krośnicki) oraz Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu (prof. Andrzej Kędzierski). W ramach tej współpracy Habilitant odbył dwa staże naukowe, jeden we Wiedniu w roku 2011, a drugi w Sofii w roku 2015, zaraz po obronie doktoratu. Pewien niedosyt pozostawia długość tych wizyt wynosząca w pierwszym przypadku 6, a w drugim 3 tygodnie. O ile czas trwania pierwszej z nich był adekwatny, ponieważ odbyła się ona przed uzyskaniem stopnia doktora, o tyle druga wydaje się zdecydowanie za krótka. Niemniej wiadomym jest, iż dotyczyła ona współpracy związanej z problematyką czysto teoretyczną, która to kooperacja może być z powodzeniem kontynuowana z dowolnego miejsca na świecie, dając możliwość codziennych konsultacji bez względu na odległość. Jak widać w przedstawionym dorobku naukowym Habilitanta, tak też się właśnie stało, ponieważ to właśnie drugi staż zaowocował znakomitymi publikacjami A12, B1, P8, i P9.

rhakalla

Kandydat był promotorem pomocniczym dysertacji doktorskiej pani Joanny Sobczuk zatytułowanej „Spektroskopia wzbudzenia i emisji stanów rydbergowskich dwuatomowych molekuł van der Waalsa zawierających metale 12. grupy układu okresowego”, obronionej w marcu 2023 z dużym sukcesem.

Pan dr Tomasz Urbańczyk prowadzi także ożywioną współpracę naukową z sektorem gospodarczym, czego wyrazem jest uczestnictwo: (a) jako lider zespołu informatycznego w projekcie badawczo-rozwojowym pt. „Opracowanie urządzenia do wspomagania wczesnej diagnostyki znamion skórnych, w tym czerniaka, za pomocą metod wizji komputerowej, modelowania przestrzennego, analizy porównawczej i klasyfikacji” (współfinansowanie ze środków NCBiR w latach 2019-2020, w ramach konsorcjum z Skopia Estetic Clinic oraz Politechniką Łódzką); (b) jako lider zespołu technicznego w projekcie „Zaprojektowanie i wykonanie prototypu symulatora badania kolonoskopowego wykorzystującego techniki wizualizacji wirtualnej i rozszerzonej rzeczywistości VR/AR” (współfinansowanie ze środków UE w latach 2014-2020); (c) jako współautor w aktualnie rozpatrywanym przez Urząd Patentowy wniosku dotyczącym rozwiązań technologicznych wykorzystywanych w konstrukcji modułu źródła naddźwiękowej wiązki molekularnej dostosowanego do wytwarzania dimerów zawierających atom cynku (we współpracy z firmą Measline).

Habilitant brał udział (jako członek) w komitetach organizacyjnych konferencji międzynarodowych w Krakowie. Były to EGAS (*European Group for Atomic Spectroscopy*) w roku 2018 oraz YAO2012 (*Young Atom Opticians Conference*) w roku 2012.

Konkludując, stwierdzam, iż pan dr Tomasz Urbańczyk wykazał się istotną aktywnością naukową zrealizowaną w więcej niż jednej instytucji naukowej, w szczególności zagranicznej. Efektywność naukową Kandydata i jego zaangażowanie w osiąganie zamierzonych celów badawczych oceniam bardzo wysoko.

4. Rekomendacja

Na podstawie pozytywnej oceny przedstawionego dorobku naukowego ze szczególnym uwzględnieniem osiągnięć stanowiących podstawę postępowania habilitacyjnego oraz istotnej aktywności naukowej realizowanej w więcej niż jednej instytucji naukowej, w szczególności zagranicznej, stwierdzam, iż **pan doktor Tomasz Urbańczyk spełnia wszystkie wymagania określone w art. 219 ust. 1. ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 30 sierpnia 2018 poz. 1668). W związku z powyższym rekomenduję Radzie Dyscypliny Nauki Fizyczne Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie nadanie panu doktorowi Tomaszowi Urbańczykowi stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki fizyczne.**

Przedstawione przez Kandydata osiągnięcia naukowe, które zostały udokumentowane pracami opublikowanymi w renomowanych czasopismach z listy JCR, uznaję za wybitne, o bardzo dużym wpływie i znaczeniu w skali międzynarodowej. Pozostałą aktywność naukową Habilitanta znajduję także na niespotykanie wysokim, imponującym poziomie. Dlatego **wnoszę o wyróżnienie.**



Dr hab. Rafał Hakalla, prof. UR