

Recenzja dorobku naukowego dr Tomasza Urbańczyka
na potrzeby wniosku o nadanie stopnia doktora habilitowanego

Dr Tomasz Urbańczyk jako podstawę swojego wniosku o nadanie stopnia dr hab. przedstawił dwa osiągnięcia. Pierwsze i główne to zestaw 12 publikacji współautorskich. W 9 z nich dr Urbańczyk jest pierwszym autorem. 8 prac dotyczy badań doświadczalnych kompleksów Van der Waalsa CdAr oraz CdNe oraz dimeru Cd₂. Praca dziewiąta jest przeglądowa zaś prace 10-12 dotyczą porównań danych doświadczalnych z dostępnymi modelami teoretycznymi.

Drugie osiągnięcie to cykl 5 publikacji; w 3 z nich dr Urbańczyk jest pierwszym autorem. Prace te mają charakter informatyczny – celem było tu zastosowanie metod numerycznych do poprawy jakości parametrów cząsteczkowych uzyskiwanych z danych doświadczalnych.

Każde z tych osiągnięć omówię oddzielnie.

Osiągnięcie główne - cykl publikacji A1-A12

Podstawą warsztatu doświadczalnego dr Tomasza Urbańczyka jest stanowisko pomiarowe oparte na impulsowej naddźwiękowej wiązce molekularnej oraz zestawie dwóch laserów barwnikowych pompowanych tym samym nanosekundowym laserem Nd:YAG. Układ impulsowej wiązki molekularnej oraz układ laserowy są zsynchronizowane w czasie – każdej próbce zimnego gazu odpowiada wzbudzający ją impuls laserowy.

Najważniejszą zaletą naddźwiękowych wiązek molekularnych jest możliwość przygotowania próbek gazów cząsteczkowych, w niskich temperaturach rzędu pojedynczych Kelwinów w wewnętrznych stopniach swobody czyli oscylacjach i rotacjach. Chłodzenie cząsteczek następuje przy rozprężaniu gazu o ciśnieniu kilku atmosfer do, prawie, próżni co skutkuje przekazaniem energii z wewnętrznych stopni swobody do energii ruchu postępowego cząsteczek. W przypadku badań doświadczalnych opisanych w pracach 1-8 wyzwaniem jest niska prężność par kadmu. Aby uzyskać wystarczającą koncentrację badanych kompleksów Van der Waalsa temperatura zbiornika z kadmem oraz samej dyszy impulsowej musi przekraczać 600° C. Dr Urbańczyk bardzo dobrze poradził sobie z tym zadaniem – skonstruował odpowiednią wysokotemperaturową dyszę impulsową i dzięki czemu mógł wykonać badania doświadczalne stanowiące podstawę jego wniosku.

Lasery barwnikowe są, ze swej natury, przestrajalne w szerokim zakresie widmowym i przez dziesięciolecia były koniem roboczym spektroskopii optycznej w obszarze widzialnym oraz bliskiego nadfioletu. Jednak w ostatnich kilkunastu lat ich rola stała się marginalna - zostały one wyparte przez źródła spójnego promieniowania oparte na efektach nieliniowych w kryształach. Nowa generacja przestrajalnych źródeł promieniowania ma znacznie szerszy zakres zmiany długości fali oraz lepsze własności spektralne (mniejsza szerokość linii) niż lasery barwnikowe. Do tego zagadnienia wrócę jeszcze w dalszej części mojej recenzji.

Pomiary spektroskopowe opisane w pracach A1-A8 polegały na rejestracji widm wzbudzenia – mierzono fluorescencję badanych indywiduów w funkcji długości fali wzbudzającego je lasera barwnikowego. Przy wzbudzeniu pojedynczym impulsem stosowano jeden laser barwnikowy zaś w metodzie podwójnego rezonansu optycznego (ang. akr. OODR) używane były dwa lasery, i dodatkowo, impulsy z jednego lasera były przetwarzane na ultrafiolet przez generację drugiej harmonicznej w kryształach nieliniowych.

Przedstawione jak osiągnięcie główne publikacje A1-A8 tego cyklu są oparte na wynikach doświadczalnych uzyskanych w układzie doświadczalnym opisanym powyżej. Praca A9 to artykuł przeglądowy zaś prace A10-A12 dotyczą obliczeń potencjałów cząsteczkowych.

Praca A1 opisuje wyniki pomiarów widm wzbudzenia kompleksu CdAr dla przejścia $B^3 1(5^3 P_1) \leftarrow X^1 0^+(5^1 S_0)$ z podstawowego poziomu oscylacyjnego pojedynczym impulsem laserowym. Pomiary wykonano dla kilku najniższych wartości liczby oscylacyjnej w stanie wzbudzonym. Widma wzbudzenia mają rozdzieloną strukturę rotacyjną dla wartości oscylacyjnej liczby kwantowej wyższych niż ok. 10. Niestety, dla mniejszych wartości oscylacyjnej liczby kwantowej takie rozdzielenie nie jest możliwe z powodu zbyt szerokiego pasma promieniowania lasera barwnikowego. Dane doświadczalne pozwoliły wyznaczyć podstawowe parametry opisujące sekwencję poziomów oscylacyjnych z dokładnością rzędu pojedynczych procentów co stanowiło postęp w porównaniu z wcześniejszymi danymi. Wyniki doświadczalne porównano także z rezultatami symulacji numerycznych uzyskując dobrą zgodność.

Praca A2 ma bardzo podobny charakter a różnica polega na wyborze innego kompleksu; tym razem jest to CdNe. Tu również udało się autorom częściowo rozdzielić strukturę rotacyjną stanu wzbudzonego na przejściu $B^3 1(5^3 P_1) \leftarrow X^1 0^+(5^1 S_0)$ aczkolwiek bez rozdzielania linii należących do gałęzi P, Q i R.

Prace doświadczalne A3-A7 opisują wyniki uzyskane w wykorzystaniu metody rezonansu optyczno-optycznego (OODR). W metodzie tej cząsteczki bądź kompleksy są wzbudzane schodkowo do wyższych stanów elektronowych. Stosuje się dwa lasery, pierwszy przenosi cząsteczki/kompleksy do wybranego poziomu oscylacyjnego albo oscylacyjno-rotacyjnego w pośrednim stanie elektronowym obsadzając wybrany poziom bądź grupę poziomów energetycznych. Przemiatanie częstotliwości drugiego lasera umożliwia rejestrację widma wzbudzenia w końcowym stanie elektronowym. OODR pozwala na wzbudzenia optyczne cząsteczki/kompleksu do stanów o wysokiej energii trudno dostępnych we wzbudzeniu bezpośrednim, które wymagało by zastosowania lasera z zakresu ultrafioletu próżniowego. Reguły wyboru dla przejść dipolowych umożliwiają wzbudzenie stanów niedostępnych przy wzbudzeniu bezpośrednim.

Praca A3 opisuje wyniki uzyskane przez dr Urbańczyka dla kompleksu Cd₂ przy wzbudzeniu do stanu $^3 1_g(6^3 S_1)$. Doświadczalne widmo wzbudzenia zostało porównane z przewidywaniami numerycznymi algorytmów LEVEL i PGOPHER a analiza przesunięć izotopowych umożliwiła przypisanie poszczególnym progresjom linii widmowych oscylacyjnych liczb kwantowych. W rezultacie autorzy pracy przypisali zmierzoną część widma wzbudzenia do stanu $^3 1_g(6^3 S_1)$ cząsteczki Cd₂ liczby oscylacyjne z zakresu 50-65 i wykorzystali te dane do odtworzenia części krzywej potencjału blisko poziomu dysocjacji cząsteczki. Jako pewną brawurę odczytuję ich postulat, że na podstawie tych danych cały potencjał da się opisać przy pomocy wzoru Morse'a.

W pracy A4 obiektem badań jest kompleks CdAr a tematem próba wyznaczenia promienia równowagowego na podstawie natężeń linii oscylacyjnych. Stosując metodę OODR wzbudzano kompleks CdAr do stanu $E^3 \Sigma_1^+$ a zarejestrowane natężenia elektronowo - oscylacyjnych linii widmowych porównywano do przewidywań ogólnodostępnych kodów LEVEL i PGOPHER, w których odległość równowagowa była zmieniana tak by otrzymać najlepszą zgodność. Uzyskana przez autorów

odległość równowagowa okazała się mniejsza niż ta raportowana wcześniej przez zespół naukowy, w którym pracuje dr Urbańczyk.

Przedmiotem badań opisanych w pracy A5 jest spektroskopia przejść stan związany $\leftarrow$ stan związany oraz stan niezwiązany $\leftarrow$ stan związany w kompleksie CdAr. Wzbudzano kompleksy ze stanu związanego $B^3\Sigma_1^+$, do stanu $E^3\Sigma_1^+$ z podwójną studnią potencjału. Odległość równowagowa stanu $B^3\Sigma_1^+$ lokuje się w obszarze bariery potencjału stanu $E^3\Sigma_1^+$ co skutkuje znaczącymi współczynnikami Franka-Kondona zarówno dla przejść do poziomów związanych jak i nie związanych stanu górnego jeżeli tylko liczba oscylacyjna stanu początkowego większa niż 1. Wynikiem tych badań było wyznaczenie wysokości oraz położenia bariery potencjału w stanie $E^3\Sigma_1^+$.

W przypadku kompleksów, w których przynajmniej jeden atom może mieć kilka izotopów obecnych w próbce rejestrowane widmo wzbudzenia składa się z szeregu progresji oscylacyjno - rotacyjnych dla odpowiednich izotopów. Ten fakt, w połączeniu z niską rozdzielczością spektralną, prowadzi do nakładania się widm poszczególnych izotopów co uniemożliwia interpretację wyników doświadczalnych. Jak pokazali autorzy pracy A5, w pewnych szczególnych przypadkach, stosowanie metody OODR pozwala częściowo rozwiązać ten problem. Wybierając mądrze długość fali wzbudzenia ze stanu podstawowego do pośredniego można „adresować” jeden z izotopów i, tym samym, uprościć widmo OODR. Wyniki dla kompleksów CdAr oraz CdKr zostały opublikowane w pracy A6.

Przedmiotem badań opisanych w pracy A7 są pomiary OODR dla cząsteczki CdAr wzbudzonej do stanu $E^3\Sigma_1^+$ z wykorzystaniem opisanej powyżej metody „adresowania” izotopów. Wyniki doświadczalne prowadzą do wniosku, że stan ten ma podwójną jamę potencjału o czym świadczy obecność poziomów oscylacyjnych o energii wyższej niż odpowiednia asymptota atomowa.

Praca A8 pokazuje, że metoda OODR może być wykorzystana do rozdzielenia struktury rotacyjnej kompleksów. Obiektem badań opisanych w pracy A8 jest kompleks CdNe wybrany ze względu na szczególnie korzystne warunki wzbudzenia stanu pośredniego umożliwiające wzbudzenie pojedynczych poziomów rotacyjnych w tym stanie. Takie selektywne wzbudzenie stanu pośredniego umożliwiło autorom pracy obserwację progresji rotacyjnych w stanie wysoko wzbudzonym $E^3\Sigma_1^+$. Umożliwiło to wyznaczenie stałych rotacyjnych dla tego stanu oraz odległości równowagowej.

Praca A9 jest publikacją przeglądową poświęconą spektroskopii kompleksu van der Waals’a Cd₂. Jest ona podsumowaniem stanu wiedzy o tym kompleksie sprzed kilku lat. W szczególności zostały tam porównane dane doświadczalne z dostępnymi wówczas wynikami obliczeń ab-initio. Dodatkowo, zaproponowano w tej pracy schemat laserowego chłodzenia cząsteczki Cd₂ wykorzystujący korzystną koincydencję odległości równowagowych dla stanów zaangażowanych w proces chłodzenia. Rozwinięcie tego pomysłu opisuje praca A10, której autorzy analizują schematy chłodzenia laserowego dla cząsteczek Cd₂ oraz Yb₂. Szczególnie interesujące wydają się być wyniki symulacji dla dimeru iterbu gdzie oczekiwana sprawność procesu chłodzenia jest bliska 90%.

W pracy oznaczonej indeksem A11 przedstawiono wyniki obliczeń ab-initio dla kompleksu van der Waals’a CdAr. Obliczenia wykonano dla kilku stanów o asymptotach atomowych wyższych niż były znane wcześniej.

Publikacja A12 to kolejny przykład obliczeń ab-initio wykonanych, tym razem, dla cząsteczki Hg₂. Ponieważ wytwarzanie dimerów rtęci jest łatwe doświadczalnie to autorzy pracy mieli dostępny bardzo duży zestaw danych doświadczalnych dzięki czemu mogli uzyskać wyższą dokładność obliczeń.

Podsumowując główne osiągnięcia dr Tomasza Urbańczyka opisane w pracach A1-A12 chcę zwrócić uwagę na ograniczenia wynikające z zastosowanej metody doświadczalnej. Używane przez dr

Urbańczyka lasery barwnikowe charakteryzują się dużą szerokością spektralną kilkadziesiąt razy przewyższającą ograniczenie fourierowskie dla 10 ns impulsów.

W konsekwencji, poza bardzo szczególnymi przypadkami, układ doświadczalny nie pozwala na rozdzielanie linii spektralnych dla przejść elektronowo - oscylacyjno – rotacyjnych oraz linii pochodzących od różnych izotopów w badanych układach cząsteczkowych. Skutkuje to widmami doświadczalnymi, w których nałożenie się dużej liczby linii daje ciągłe pasmo. Nawet jeśli stosowane przez dr Urbańczyka i jego współpracowników modele numeryczne pozwalają odtworzyć widmo wzbudzenia w takich warunkach to porównywanie tych ciągłych pasm jest obarczone dużą niepewnością. Bez wątpienia dużo lepsze wyniki dałoby zastosowanie przestrajalnych źródeł laserowych o mniejszej szerokości linii. Mogę tylko przypuszczać, że dr Tomasz Urbańczyk był i jest świadom tego ograniczenia ale nie miał możliwości przebudowy układu doświadczalnego w kierunku, o którym piszę.

Osiągnięcie nr 2

Cykl 5 prac dotyczących odzyskiwania potencjałów elektronowych z danych doświadczalnych. Pierwsza z nich (B1) powstała we współpracy z Asenem Pashovem z Uniwersytetu w Sofii twórcą szeroko stosowanej metody odzyskiwania potencjału pod nazwą Inverted Perturbation Approach. Celem było wyznaczenie dokładności odzyskiwania potencjałów cząsteczkowych z danych z częściowo tylko rozdzieloną strukturą rotacyjną. Stosowane były dane wygenerowane dla zadanych potencjałów, które były zaszumiane przed podaniem ich na wejście programu odtwarzającego potencjał cząsteczkowy na podstawie minimalizacji funkcji χ^2 liczonej jako suma kwadratów różnic energii poziomów oscylacyjnych doświadczalnych oraz tych pochodzących z modelu. Okazało się, że nawet dla widm zaszumionych można odzyskać dane czteroparametrowego potencjału z dokładnością rzędu promila.

Dwie kolejne publikacje dotyczą odtwarzania potencjałów cząsteczkowych za pomocą algorytmów opartych na sieci neuronowej. Postały one we współpracy z grupą prof. Marka Krośnickiego z Uniwersytetu Gdańskiego. W pracy B2 celem było jak najwierniejsze odtworzenie potencjału stanu $B^1 1_u$ dimeru kadmu. Podobnie jak w pracy B1 zestaw danych treningowych dla sieci neuronowej powstał został wygenerowany numerycznie na podstawie potencjału podobnego do potencjału stanu $b^3 0_u^+$. Wytrenowany algorytm użył danych doświadczalnych dla przejścia $B^1 1_u \leftarrow X^1 0_g^+$ do wyznaczenia potencjału stanu $B^1 1_u$ w dimerze Cd_2 . Odtworzony w ten sposób potencjał dał położenia poziomów oscylacyjnych stanu $B^1 1_u$ bardzo bliskie danym doświadczalnym z błędami mniejszymi niż te dla metody IPA. W pracy B3 dr Urbańczyk rozwinął opisaną powyżej metodę stosując głęboką sieć neuronową z zastosowaniem do potencjału $X^2 \Sigma^+$ w cząsteczce MgF . W kolejnej pracy z tego cyklu oznaczonej symbolem B4 zastosowano sieć neuronową do odtworzenia części odpychającej stanu $B^1 1_u$ w dimerze rtęci. Danymi wejściowymi było tu widmo doświadczalne dla przejścia zawierające złożone zarówno z przejść $związany \rightarrow niezwiązany$ jak i przejścia $związany \rightarrow związany$. Odtworzony potencjał stanu $B^1 1_u$ daje widma obliczone na jego podstawie zgodne z danymi doświadczalnymi.

Cykl prac dotyczących metod odtwarzania potencjałów molekularnych z widm doświadczalnych zamyka praca B5, której autorzy zastosowali algorytm genetyczny. Używając go dla dwóch różnych modeli potencjału EMO i Morse pokazali, że dla przejść $E^3 \Sigma_{1in}^+ \leftarrow A^3 \Pi_{0+}$ w cząsteczce $CdAr$ można uzyskać dobrą zgodność z doświadczeniem przynajmniej dla niewielkich wartości oscylacyjnej liczby kwantowej.

Podsumowując, przedstawiony do oceny dorobek naukowy dr Tomasza Urbańczyka jest bardzo obszerny; w przedstawionych jako dwa oddzielne osiągnięcia jest łącznie 17 prac współautorskich

opublikowanych w czasopiśmie międzynarodowych różnej rangi. W 12 publikacjach dr Urbańczyk jest pierwszym autorem co dobrze koresponduje z jego własnym opisem wkładu do wszystkich 17 publikacji. Publikacje w międzynarodowych czasopiśmie naukowych wskazują na wystarczającą oryginalność wyników naukowych dr Tomasza Urbańczyka. Zastanawia jednak bardzo słaby odzew środowiska naukowego na wyniki przedstawione w tych publikacjach. Przeciętna liczba cytowań prac w cyklu A jest poniżej 7 a dla cyklu B nawet poniżej 2 mimo, że prace te zostały opublikowane w dobrych żurnalach naukowych. Nie rozumiem dlaczego tak jest.

Reasumując, uważam, że dorobek naukowy dr Tomasza Urbańczyka po uzyskaniu stopnia doktora spełnia wymogi ustawowe i zwyczajowe dla przyznania mu stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie fizyki i wnioskuję o nadanie mu tego stopnia.

C. Rad