

Autoreferat

dr Katarzyna Bielska

1. Posiadane dyplomy i stopnie naukowe

- magister fizyki, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, 2007
promotor: prof. dr hab. Ryszard S. Trawiński
tytuł pracy: „Rozszerzenie ciśnieniowe składowych nadsubtelnych linii widmowej 326,1 nm ^{113}Cd zaburzonej argonem i ksenonem”
- doktor nauk fizycznych w zakresie fizyki, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, 2011
promotor: prof. dr hab. Ryszard S. Trawiński
tytuł rozprawy: „Spektroskopowe badania prężności pary nasyconej lodu”

2. Informacja o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych lub artystycznych

- 12.2011-09.2015: asystent, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej, Instytut Fizyki, Zakład Fizyki Atomowej, Molekularnej i Optycznej, stanowisko naukowo-dydaktyczne
- 02.2012 - 09.2014: urlop bezpłatny na Uniwersytecie Mikołaja Kopernika w Toruniu w celu odbycia stażu podoktorskiego w National Institute of Standards and Technology
- 10.2015 - obecnie: adiunkt, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej, Instytut Fizyki, Zakład (później Katedra) Fizyki Atomowej, Molekularnej i Optycznej, stanowisko naukowe w okresie 6 miesięcy w roku 2018, poza tym stanowisko naukowo-dydaktyczne

3. Omówienie osiągnięć, o których mowa w art. 219 ust. 1 pkt. 2 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2021 r. poz. 478 z późn. zm.).

3.1. Wstęp

Moim długofalowym celem naukowym jest uzyskiwanie dokładnych modeli widm małych molekuł, takich jak cząsteczka tlenu, tlenku i dwutlenku węgla, tak aby możliwe było skuteczne ich wykorzystywanie zarówno w badaniach podstawowych, jak i zastosowaniach praktycznych. Moje zainteresowania naukowe koncentrują się wokół spektroskopii, w szczególności molekularnej. Obejmują rozwój technik eksperymentalnych, analizę danych oraz relacje między wynikami prac doświadczalnych i teoretycznych. Wśród nich szczególne miejsce zajmuje współpraca z grupami teoretycznymi tworzącymi narzędzia umożliwiające konstruowanie dokładnych modeli widm. Narzędzia te wymagają jednak dokładnej weryfikacji eksperymentalnej, aby można było przy ich pomocy przewidywać parametry widm w warunkach i zakresach widmowych, w których obecnie nie ma możliwości przeprowadzenia pomiarów laboratoryjnych o wysokiej dokładności.

3.1.1. Znaczenie precyzyjnej spektroskopii w badaniach atmosfery, metrologii i badaniach podstawowych

Spektroskopia umożliwia zdalne pomiary wykorzystywane między innymi w badaniach atmosfery ziemskiej oraz astrofizyce. Obserwacje atmosfery ziemskiej mogą być prowadzone zarówno z satelitów jak i z powierzchni Ziemi, i są wykorzystywane do monitorowania jej składu i parametrów, oraz badania zachodzących w niej procesów. Interpretacja tych pomiarów wymaga użycia danych referencyjnych dla wszystkich cząsteczek występujących w atmosferze, mających istotny wkład do absorpcji w danym zakresie widmowym. Wówczas możliwa jest detekcja cząsteczek występujących w atmosferze ziemskiej w śladowych ilościach, jednak kluczowych dla jej stanu, takich jak tlenek węgla czy różnego rodzaju zanieczyszczenia. Konieczna jest znajomość wszystkich istotnych parametrów linii widmowych: nie tylko położenia i natężeń, ale także parametrów kształtu linii, takich jak ciśnieniowe rozszerzenie i przesunięcie. Ponadto, coraz wyższe wymagania odnośnie dokładności powodują, że powszechnie używany do opisu kształtu linii widmowych profil Voigta jest niewystarczający, potrzebna jest również znajomość parametrów opisujących bardziej subtelne efekty prowadzące między innymi do zwężenia i asymetrii linii widmowych. Z tego powodu zarówno cząsteczki będące głównymi składnikami atmosfery, jak i występujące w niej śladowych ilościach, są przedmiotem zainteresowania licznych grup badawczych zajmujących się tą tematyką.

Jedną z molekuł kluczowych dla badań składu atmosfery jest cząsteczka tlenu. Pomiary absorpcji przez tlen molekularny są wykorzystywane między innymi do określania profilu ciśnienia i temperatury w atmosferze^{*1}, stanowiąc podstawę do interpretacji wyników pomiarów prowadzonych dla innych cząsteczek. Do niedawna w badaniach atmosferycznych wykorzystywane było przede wszystkim tzw. pasmo A, któremu odpowiada zakres widmowy około 760 nm. Działo się tak gdyż jest to najsilniejsze pasmo absorpcyjne tlenu w czerwonej części widma oraz ze względu na brak dokładnych danych referencyjnych dla pozostałych pasm, w szczególności dla około 15 razy słabszego pasma B, któremu odpowiada zakres długości fali około 690 nm. Pokazano jednak, iż uwzględnienie poza pasmem A innych pasm może istotnie poprawić dokładność uzyskiwanych wyników. Tak jest na przykład w przypadku określania parametrów chmur, gdzie uwzględnienie oprócz pasma A także pasma B oraz pasma pochodzącego od kompleksów O₂ – O₂ (ok. 477 nm) prowadzi do redukcji niepewności wyznaczanych parametrów o ponad 50%². Innym przykładem wykorzystania słabszego pasma B tlenu jest określanie parametrów wiatrów³ występujących w górnych warstwach atmosfery oraz monitorowanie występowania aerozoli w atmosferze⁴.

Ważnymi molekułami, wpływającymi na globalne własności atmosfery, są tlenek i dwutlenek węgla. Tlenek węgla występuje w atmosferze w śladowych ilościach, jednak jego zawartość ma kluczowe znaczenie dla klimatu oraz jakości powietrza. Dostaje się on do atmosfery na skutek emisji przez człowieka oraz spalania biomasy, a także powstaje w reakcjach chemicznych zachodzących w atmosferze. Jego czas życia w atmosferze ziemskiej jest ograniczony do tygodni lub miesięcy, w zależności od pory roku i wysokości. Dzięki temu wykorzystywany jest m. in. do monitorowania procesów transportu zachodzących w atmosferze⁵. Tlenek węgla bierze również udział w reakcjach chemicznych zachodzących w atmosferze i prowadzących do powstawania gazów cieplarnianych, takich jak dwutlenek węgla i ozon, oraz wpływa na zawartość metanu w atmosferze ziemskiej, stąd ma istotne znaczenie dla badań nad klimatem i jego zmianami⁶. Natomiast dwutlenek węgla silnie wpływa na efekt cieplarniany. Jego zawartość w atmosferze ziemskiej, na skutek działalności człowieka, stale rośnie. Tylko w okresie między rokiem 1970 i 2010 koncentracja dwutlenku węgla wzrosła o prawie 20%⁷. Z tego powodu szczególnie ważne jest dokładne określanie zarówno źródeł dwutlenku węgla jak i kanałów, którymi jest on usuwany z atmosfery. Od kilkunastu lat jest określony cel, jakim jest monitorowanie zawartości dwutlenku węgla na poziomie 1 ppm (ang. *part-per-million*), co odpowiada względnym niepewnościom standardowym

*Odniesienia do literatury w niniejszym opracowaniu w postaci [Hx] oznaczają pozycje wymienione w rozdziale I „Wykazu osiągnięć naukowych”, natomiast odniesienia w postaci [x] oznaczają moje pozostałe publikacje wymienione w rozdziale II.4 tego wykazu. Odniesienia do innych pozycji literaturowych zostały umieszczone w przypisach.

¹C. R. Nowlan et al., Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **108**, 371–388 (2007).

²J. S. Daniel, Journal of Geophysical Research **108**, 4515 (2003).

³D. A. Ortland et al., Journal of Geophysical Research: Atmospheres **101**, 10351–10363 (1996).

⁴S. Sanghavi et al., Atmospheric Measurement Techniques **5**, 1099–1119 (2012).

⁵J. A. Logan et al., Journal of Geophysical Research **86**, 7210 (1981).

⁶A. Voulgarakis et al., Atmospheric Chemistry and Physics **13**, 2563–2587 (2013).

⁷J. M. Barlow et al., Atmospheric Chemistry and Physics **15**, 13739–13758 (2015).

około 0.25%⁸. Jednak dopiero od niedawna zaczynają być dostępne dane referencyjne, które w przyszłości mogą umożliwić uzyskanie zakładanej dokładności pomiarów w atmosferze ziemskiej⁹. Zwykle, nawet jeśli są dostępne dane o wystarczającej dokładności, brakuje ich niezależnego potwierdzenia przez inną grupę badawczą, natomiast rozrzuty wyników uzyskiwanych w różnych laboratoriach istotnie przekraczają 1% wartości natężeń linii.

Wymienione powyżej cząsteczki są stosunkowo proste, gdyż składają się z zaledwie dwóch lub trzech atomów. Ze względu na ich znaczenie dla atmosfery ziemskiej są badane przez wiele grup teoretycznych i doświadczalnych, jednak do tej pory brakuje dokładnych wartości parametrów umożliwiających symulacje widm. Jednocześnie pojawiają się coraz większe oczekiwania. Poza wspomnianym już dwutlenkiem węgla, brakuje możliwości monitorowania zawartości tlenku węgla. W tym przypadku World Meteorological Organization (WMO) zaleca między-laboratoryjne porównania zawartości tlenku węgla na poziomie 1 ppb (ang. *part-per-billion*) lub ze względną niepewnością standardową na poziomie 0.5%¹⁰.

Powyższe rozważania koncentrują się na zarysie problemów związanych ze zdalnymi pomiarami w atmosferze ziemskiej. W naturalny sposób problem rozszerzony jest na obserwacje astronomiczne. Ich interpretacja jest jeszcze trudniejsza niż w przypadku atmosfery ziemskiej ze względu na możliwość występowania bardziej różnorodnych molekuł oraz znacznie szerszy zakres warunków termodynamicznych, które przekraczają obecne możliwości odtwarzania ich w warunkach laboratoryjnych. Jednym z wielu przykładów są badania egzoplanet, wśród których w atmosferach planet typu „gorący Jowisz” (ang. *hot-Jupiter*) temperatura może osiągać nawet 2800 K. Pomimo stosunkowo słabej jakości i rozdzielczości widm, ich interpretacja wymaga znajomości nie tylko położenia i natężeń, ale również pozostałych parametrów linii widmowych wraz z ich zależnościami od temperatury¹¹.

Spektroskopia molekularna wnosi istotny wkład w badania podstawowe. Oczywistą konsekwencją wyznaczenia parametrów widma jest pozyskanie informacji o strukturze energetycznej molekuly, prawdopodobieństwie przejść między stanami energetycznymi cząsteczki oraz o zderzeniach z cząsteczkami gazu zaburzającego. Możliwe są również bardziej zaawansowane zastosowania spektroskopii atomowej i molekularnej w badaniach podstawowych¹² nie tylko w przypadku spektroskopii najprostszyc cząsteczek, lecz również molekuł wieloatomowych¹³. Przykładem wkładu spektroskopii do badań podstawowych może być pomiar przejścia ${}^6\text{S} - {}^7\text{S}$ w atomach cezu, którego istnienie jest dowodem na niezachowanie parzystości¹⁴. Z kolei precyzyjna spektroskopia cząsteczki wodoru i jej izotopologów oraz jonów¹⁵ bądź słabo związanych molekuł¹⁶, takich jak Yb_2 , w połączeniu z zaawansowanymi obliczeniami teoretycznymi, może być obszarem poszukiwań dowodów na istnienie tzw. „piątej siły”, czyli postulowanego, nieznanego jeszcze oddziaływania. Większe molekuly mogą natomiast być wykorzystane na przykład w badaniach dotyczących niezmienności stałych fizycznych¹⁷. Takie badania wymagają jednak zazwyczaj wyjątkowej precyzji i dokładności pomiaru, oraz wysokiej czułości układu eksperymentalnego. Znacząco wykraczają one poza standardowe możliwości powszechnie stosowanych spektrometrów, będąc kolejnym źródłem motywacji do rozwoju technik pomiarowych.

Istotną kwestią jest wykorzystanie spektroskopii molekularnej w metrologii. Proponowano wykorzystanie technik spektroskopowych przy określaniu nowych wzorców temperatury¹⁸ oraz ciśnienia¹⁹, jednak wymagają one znajomości natężeń linii widmowych z dokładnością istotnie wyższą niż osiągalna obecnie. Natomiast metody spektroskopowe mogą obecnie być konkurencyjne dla precyzyjnej spektrometrii masowej²⁰. Proponuje się również wykorzystanie częstotliwości przejść molekularnych jako wzorców częstotliwości²¹.

⁸C. E. Miller et al., *Journal of Geophysical Research Atmospheres* **112**, 1–19 (2007).

⁹D. A. Long et al., *Geophysical Research Letters* **47**, e2019GL086344 (2020).

¹⁰P. Tans and P. Zellweger, *18th WMO/IAEA meeting on carbon dioxide, other greenhouse gases and related measurement techniques (GGMT-2015)*, GAW Report No. 229 (World Meteorological Organization, 2016).

¹¹P. F. Bernath, *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **372**, 20130087–10 (2014).

¹²M. S. Safronova et al., *Reviews of Modern Physics* **90**, 025008 (2018).

¹³N. R. Hutzler, *Quantum Science and Technology* **5**, 044011 (2020).

¹⁴C. S. Wood, *Science* **275**, 1759–1763 (1997).

¹⁵E. J. Salumbides et al., *Physical Review D* **87**, 112008 (2013).

¹⁶M. Borkowski et al., *Scientific Reports* **9**, 14807 (2019).

¹⁷M. G. Kozlov, *Physical Review A* **87**, 032104 (2013).

¹⁸M. P. Arroyo and R. K. Hanson, *Applied Optics* **32**, 6104 (1993), R. Gotti et al., *Physical Review A* **97**, 012512 (2018).

¹⁹R. Wehr et al., *Applied Optics* **42**, 6595 (2003), C. Gaiser et al., *Nature Physics* **16**, 177–180 (2020).

²⁰A. J. Fleisher et al., *Nature Physics* **17**, 889–893 (2021).

²¹F. Riehle et al., *Metrologia* **55**, 188–200 (2018).

Z punktu widzenia badań atmosferycznych, ważne są w szczególności stosunkowo słabe linie i pasma absorpcyjne, które nie są nasycane na wielokilometrowej drodze absorpcji. Powoduje to oczywiste utrudnienia w pomiarach laboratoryjnych. Silniejsze spośród tych linii mogą być badane przy użyciu spektrometrów fourierowskich z długimi komórkami. Słabsze, takie jak pasmo B tlenu, w warunkach laboratoryjnych wymagają wydłużania drogi absorpcji na przykład poprzez zastosowanie wnęk optycznych o wysokim *finesse*.

W swojej dotychczasowej pracy badawczej dążyłam do wypracowania technik umożliwiających uzyskanie dokładnych parametrów kształtu linii widmowych i tym samym dokładne symulacje tych widm. Moja praca obejmowała zarówno rozwój technik eksperymentalnych opartych o wnęki optyczne, analizę danych przy użyciu zaawansowanych profili linii widmowych, jak i współpracę z grupą zajmującą się obliczeniami teoretycznymi, prowadzącą do powstania nowych modeli widm.

3.1.2. Metody pomiarowe

W swojej pracy wykorzystuję metody pomiarowe, w których próbka gazu umieszczona jest we wnęce optycznej. Jest to zarówno dobrze znana technika spektroskopii strat we wnęce (CRDS, ang. *cavity ring-down spectroscopy*)²² jak również opracowana ostatnio technika opierająca się o pomiar dyspersyjnych przesunięć modów rezonansowych wnęki optycznej - CMDS (ang. *cavity mode-dispersion spectroscopy*)²³ [23].

Głównym elementem spektrometru typu CRDS jest wnęka optyczna zbudowana ze zwierciadeł o wysokim współczynniku odbicia (typowo $R \geq 0.9997$). W typowym układzie, wnęka jest pompowana wiązką lasera o częstotliwości dopasowanej do częstotliwości jednego z modów rezonansowych wnęki. Następnie pompowanie jest przerywane, na przykład poprzez szybkie odstrojenie częstotliwościowe lub wyłączenie wiązki pompującej. Jeśli wiązka pompująca jest na tyle wąska spektralnie, że pompowany jest tylko jeden mod rezonansowy wnęki, rejestrowany jest eksponencjalny zanik natężenia światła wyciekającego przez jedno ze zwierciadeł. Wówczas współczynnik absorpcji α może być wyznaczony o na podstawie stałej zaniku τ z zależności:

$$\frac{1}{c\tau} = \alpha + \alpha_{bg}, \quad (1)$$

gdzie c oznacza prędkość światła, natomiast α_{bg} odpowiada stratom w przypadku braku absorpcji, wynikającym ze współczynnika odbicia zwierciadeł oraz rozproszenia światła. Długość drogi optycznej na której wiązka jest absorbowana może osiągać wiele kilometrów, z czego wynika bardzo wysoka czułość spektrometrów CRDS. Umożliwiają one pomiary linii widmowych o natężeniach nieznacznie przekraczających 10^{-31} cm/molecule²⁴. Ich zaletą jest w szczególności niewrażliwość na fluktuacje mocy wiązki laserowej oraz brak konieczności znajomości faktycznej długości drogi absorpcji. Natomiast podstawowe ograniczenia wynikają z konieczności dokładnego wyznaczania stałych zaniku, które w typowych układach wynoszą od kilku do kilkuset mikrosekund, i maleją wraz ze wzrostem absorpcji. Ich wyznaczenie wymaga szybkich, wysoce liniowych detektorów optycznych oraz przetworników analogowo-cyfrowych.

Alternatywą dla wyznaczania stałych zaniku może być pomiar szerokości modu wnęki prowadzący do techniki CMWS (ang. *cavity mode-width spectroscopy*)²⁵. Kształt modu wnęki optycznej w dobrym przybliżeniu może być opisany profilem Lorentza. O ile w technice CRDS, ze wzrostem absorpcji długość stałej zaniku maleje, w technice CMWS szerokość modu wnęki rośnie ze wzrostem absorpcji. Dzięki temu technika CMWS umożliwia dokładne pomiary widma w warunkach, w których stała zaniku jest zbyt krótka i technika CRDS przestaje prowadzić do dokładnych wyników [23]. Technika ta nie wymaga użycia szybkiego detektora oraz przetwornika analogowo-cyfrowego, jednak muszą one charakteryzować się liniową odpowiedzią.

Metodą pomiarową komplementarną do CRDS oraz CMWS jest technika CMDS. W odróżnieniu od technik absorpcyjnych, jakimi są CRDS i CMWS, w tym przypadku wyznaczana jest rezonansowa dyspersja w próbce, która jest powiązana z absorpcją równaniami Kramersa-Kröniga. W praktyce, pomiar sprowadza się do określenia przesunięcia częstotliwości modu rezonansowego wnęki na skutek dyspersji, w porównaniu z sytuacją braku rezonansowej dyspersji. Również w tej technice nie jest wymagane użycie szybkich detektorów i przetworników. Zarówno na pionowej jak i poziomej osi widma wyznaczana jest częstotliwość, czyli wielkość fizyczna, którą

²²A. O'Keefe and D. A. G. Deacon, Review of Scientific Instruments **59**, 2544–2551 (1988).

²³A. Cygan et al., Optics Express **23**, 14472–14486 (2015).

²⁴S. Kassi et al., Chemical Physics Letters **582**, 6–9 (2013).

²⁵A. Cygan et al., Optics Express **21**, 29744–29754 (2013), D. A. Long et al., Applied Physics B: Lasers and Optics **114**, 489–495 (2014).

obecnie można mierzyć najdokładniej²⁶, co zapewnia liniowość tej techniki pomiarowej. Powoduje to dalsze rozszerzenie zakresu dynamicznego w porównaniu z techniką CMWS. Warto zauważyć, iż widmo absorpcyjne i dyspersyjne w technikach CMWS oraz CMDS można uzyskać z tego samego pomiaru, w którym na podstawie pomiaru kształtu modu wnęki wyznacza się jego szerokość bądź położenie. CMDS jest metodą pomiarową dokładniejszą niż CRDS i CMWS [23], natomiast czas pomiaru metodami CMDS oraz CMWS jest istotnie dłuższy niż w przypadku CRDS. Ponadto technika CMDS wymaga ciasnego dowiązania częstotliwości wiązki laserowej do modu rezonansowego wnęki. Obecnie nie jest powszechnie stosowana między innymi ze względu na ograniczony dostęp do szeroko przestrajalnych modulatorów elektro-optycznych, co ogranicza zakres widmowy, w którym może być stosowana.

Powyższe informacje dotyczą pomiaru absorpcji bądź dyspersji. Istotną kwestią jest również pomiar częstotliwości wiązki próbkującej, czyli określenie osi poziomej widma. Gdy wymagana jest wysoka dokładność, pomiar częstotliwości wiązki próbkującej komercyjnym miernikiem długości fali bazującym na interferometrze Michelsona jest zwykle niewystarczający, gdyż mierniki takie charakteryzuje niepewność pomiaru na poziomie kilkudziesięciu megaherców. W opisanych powyżej technikach, względna oś częstotliwości może być stosunkowo prosto i dokładnie określona w oparciu o pomiar przedziału dyspersji wnęki (FSR, ang. *free spectral range*), który może być wykonany przy użyciu miernika długości fali, a jego dokładność może być wielokrotnie lepsza niż dokładność samego miernika²⁷. Taka względna oś częstotliwości umożliwia uzyskanie dobrej jakości widm techniką CRDS, o ile długość wnęki rezonansowej spektrometru jest stabilizowana, co prowadzi do techniki FS-CRDS (ang. *frequency-stabilized cavity ring-down spectroscopy*)²⁸. Natomiast w technikach CMWS oraz CMDS, jak również w spektrometrach CRDS w układzie dwuwiazkowym, możliwe jest dokładniejsze określenie względnej częstotliwości poprzez pomiar przedziału dyspersji na podstawie odstrojenia między wiązką lokującą i próbkującą, które są odstrojone od siebie o całkowitą liczbę modów podłużnych wnęki. Dokładny pomiar bezwzględnej częstotliwości wiązki próbkującej w każdym punkcie rejestrowanego widma jest możliwy na przykład dzięki wykorzystaniu optycznego grzebienia częstotliwości (OFC, ang. *optical frequency comb*). W ten sposób wyznaczana jest bezwzględna częstotliwość wiązki próbkującej w większości pomiarów wykonywanych powyższymi technikami w Instytucie Fizyki UMK od roku 2012²⁹. Umożliwia ona zarówno dokładne pomiary położenia linii widmowych, jak i współczynników zderzeniowego przesunięcia linii.

3.1.3. Analiza danych - profile kształtu linii widmowych

W najprostszym podejściu kształt molekularnych linii widmowych w warunkach, w których istotne jest zarówno rozszerzenie dopplerowskie jak i efekty zderzeniowe, opisywany jest powszechnie znanym i stosowanym profilem Voigta (VP). Jest on splotem profilu gaussowskiego i lorentzowskiego, uwzględniając efekty rozszerzenia dopplerowskiego, jak również zderzeniowego rozszerzenia i przesunięcia linii. Jest to jednak podejście uproszczone, w którym pominięty jest szereg efektów wpływających na kształt linii widmowych. Istnieje wiele prac doświadczalnych pokazujących, że użycie profilu Voigta może prowadzić do istotnych błędów systematycznych³⁰.

Profilem kształtu linii widmowych obecnie rekomendowanym przez IUPAC³¹ (International Union of Pure and Applied Chemistry) dla molekularnych baz danych takich jak HITRAN³² jest profil Hartmann-Tran (HTP)³³. Poza efektami uwzględnianymi w VP, uwzględnia on szereg innych, subtelnych efektów wpływających na kształt linii widmowych. W HTP uwzględnione są efekty zależności zderzeniowego rozszerzenia i przesunięcia linii od prędkości absorbera³⁴, które powodują zwięźnienie linii oraz jej asymetrię. HTP uwzględnia też efekty związane ze zmianą prędkości absorbera na skutek zderzeń prowadzące do tzw. zwięźnienia Dicke'go³⁵. W profilu HTP zderzenia te są traktowane zgodnie z modelem zderzeń twardych. Ponadto w HTP uwzględnione jest

²⁶T. W. Hänsch, *Reviews of Modern Physics* **78**, 1297–1309 (2006).

²⁷J. T. Hodges et al., *Review of Scientific Instruments* **75**, 849–863 (2004).

²⁸J. T. Hodges and D. Lisak, *Applied Physics B: Lasers and Optics* **85**, 375–382 (2006).

²⁹J. Domysławska et al., *Journal of Chemical Physics* **136**, 024201 (2012).

³⁰P. Duggan et al., *Journal of Molecular Spectroscopy* **186**, 90–98 (1997).

³¹J. Tennyson et al., *Pure and Applied Chemistry* **86**, 1931–1943 (2014).

³²I. Gordon et al., *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **277**, 107949 (2022).

³³N. Ngo et al., *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **129**, 89–100 (2013), N. Ngo et al., *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **134**, 105 (2014).

³⁴P. R. Berman, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **12**, 1331–1342 (1972).

³⁵R. H. Dicke, *Physical Review* **89**, 472–473 (1953).

występowanie korelacji między zderzeniami zmieniającymi fazę i prędkość. Asymetria związana z efektem mieszania linii³⁶ nie jest uwzględniona w oryginalnym profilu HTP, jednak może być do niego w prosty sposób dodana. Profil HTP opiera się na bardziej ogólnych wyrażeniach³⁷ podanych przez Pine'a. Pokazano, iż jest on wystarczająco dokładny dla zastosowań atmosferycznych³⁸ przy stosunkowo niskiej złożoności numerycznej, co umożliwia jego szerokie zastosowanie w praktyce.

HTP może zostać uproszczony w taki sposób, aby otrzymać inne, powszechnie stosowane profile linii widmowych. W tym celu wystarczy wyzerować odpowiednie jego parametry. Wyzerowanie parametru korelacji prowadzi do zależnego od prędkości profilu Nelkina-Ghataka³⁹ (SDNGP). Jeśli dodatkowo wyzerowany zostanie parametr opisujący zwężenie Dicke'go, otrzymamy zależny od prędkości profil Voigta⁴⁰ (SDVP). Wyzerowanie ponadto parametrów opisujących zależność zderzeniowego rozszerzenia i przesunięcia linii od prędkości prowadzi natomiast do profilu Voigta w jego podstawowej postaci. HTP może również zostać uproszczony do profilu Nelkina-Ghataka⁴¹ (NGP), jeśli wyzerowane zostaną parametry zależności od prędkości oraz korelacji. Natomiast w wyniku uproszczenia HTP nie można otrzymać profili, w których zderzenia zmieniające prędkość absorbera są opisywane w ramach modelu zderzeń miękkich, czyli profilu Galatry'ego⁴² (GP) oraz jego wersji uwzględniającej zależność rozszerzenia i przesunięcia linii od prędkości, czyli zależnego od prędkości profilu Galatry'ego⁴³ (SDGP). Ponadto, w HTP oraz profilach, do których można go uprościć, zależność zderzeniowego rozszerzenia i przesunięcia linii od prędkości absorbera jest uwzględniana zgodnie z tzw. przybliżeniem kwadratowym⁴⁴. Drugi powszechnie stosowany opis tych efektów oparty jest o zastosowanie konfluentnych funkcji hipergeometrycznych⁴⁵ i wynika z założenia, że potencjał oddziaływania między cząsteczkami absorbera i zaburzacza jest postaci r^{-q} , gdzie r jest odległością między oddziałującymi cząsteczkami.

VP jest prostym profilem o stosunkowo małej liczbie dopasowywanych parametrów, natomiast każdy kolejny uwzględniany w profilu efekt powoduje zwiększenie liczby parametrów. W HTP jest ich dziewięć: położenie i natężenie linii, zderzeniowe rozszerzenie i przesunięcie, szerokość dopplerowska, częstotliwość zderzeń optycznych (zwężenie Dicke'go), dwa parametry związane z efektami zależności od prędkości zderzeniowego rozszerzenia i przesunięcia linii oraz parametr opisujący korelacje między zderzeniami różnego typu. Szerokość dopplerowska w wielu przypadkach może być określona na podstawie temperatury, jednak pozostałe parametry zwykle są dopasowywane. Zazwyczaj dopasowywane są również parametry opisujące tło widma, charakteryzujące się dużą niepewnością. Tak duża liczba dopasowywanych parametrów może prowadzić do numerycznych korelacji pomiędzy nimi. Wpływ tych korelacji na otrzymywane parametry kształtu linii może być zredukowany dzięki zastosowaniu techniki analizy danych, w której widma uzyskane dla różnych ciśnień są analizowane jednocześnie, natomiast poszczególne parametry kształtu linii są dopasowywane jako współczynniki ciśnieniowe lub wartości niezależne od ciśnienia⁴⁶. Jest to tak zwana technika *multispectrum fit*⁴⁷.

3.2. Omówienie osiągnięcia „Precyzyjna spektroskopia słabych linii widmowych cząsteczek o znaczeniu atmosferycznym”

Na moje najważniejsze osiągnięcie naukowe, zatytułowane „Precyzyjna spektroskopia słabych linii widmowych cząsteczek o znaczeniu atmosferycznym”, składa się poniższy cykl pięciu publikacji:

H1. O. L. Polyansky, **K. Bielska**, M. Ghysels, L. Lodi, N. F. Zobov, J. T. Hodges, J. Tennyson, *High-accuracy CO₂ line intensities determined from theory and experiment*, Phys. Rev. Lett. **114**, 243001 (2015)

³⁶A. Pine and R. Ciurylo, Journal of Molecular Spectroscopy **208**, 180–187 (2001).

³⁷A. Pine, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **62**, 397–423 (1999), B. Lance et al., Journal of Molecular Spectroscopy **185**, 262–271 (1997).

³⁸N. Ngo et al., Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **203**, 325–333 (2017).

³⁹B. Lance et al., Journal of Molecular Spectroscopy **185**, 262–271 (1997).

⁴⁰P. R. Berman, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **12**, 1331–1342 (1972).

⁴¹M. Nelkin and A. Ghatak, Physical Review **135**, A4–A9 (1964).

⁴²L. Galatry, Physical Review **122**, 1218–1223 (1961).

⁴³R. Ciurylo and J. Szudy, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **57**, 411–423 (1997).

⁴⁴D. Priem et al., Journal of Molecular Structure **517-518**, 435–454 (2000).

⁴⁵J. Ward et al., Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **14**, 555–590 (1974).

⁴⁶A. Pine and R. Ciurylo, Journal of Molecular Spectroscopy **208**, 180–187 (2001), A. Pine and T. Gabard, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **66**, 69–92 (2000).

⁴⁷D. C. Benner et al., Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **53**, 705–721 (1995).

- H2. **K. Bielska**, S. Wójtewicz, P. Morzyński, P. Ablewski, A. Cygan, M. Bober, J. Domysławska, M. Zawada, R. Ciuryło, P. Masłowski, D. Lisak, *Absolute frequency determination of molecular transition in the Doppler regime at kHz level of accuracy*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. T **201**, 156-160 (2017)
- H3. **K. Bielska**, J. Domysławska, S. Wójtewicz, A. Balashov, M. Słowiński, M. Piwiński, A. Cygan, R. Ciuryło, D. Lisak, *Simultaneous observation of speed dependence and Dicke narrowing for self-perturbed P-branch lines of O₂ B band*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. T **276**, 107927 (2021)
- H4. **K. Bielska**, A. Cygan, M. Konefał, G. Kowzan, M. Zaborowski, D. Charczun, S. Wójtewicz, P. Wcisło, P. Masłowski, R. Ciuryło, D. Lisak, *Frequency-based dispersion Lamb-dip spectroscopy in a high finesse optical cavity*, Opt. Express **29**, 39449-39460 (2021)
- H5. **K. Bielska**, A. A. Kyuberis, Z. D. Reed, G. Li, A. Cygan, R. Ciuryło, E. M. Adkins, L. Lodi, N. F. Zobov, V. Ebert, D. Lisak, J. T. Hodges, J. Tennyson, O. L. Polyansky, *Subpromille measurements and calculations of CO (3–0) overtone line intensities*, Phys. Rev. Lett. **129**, 043002 (2022)

Wśród nich praca [H4], opublikowana w czasopiśmie *Optics Express*, została wyróżniona jako „Editor’s pick”, natomiast praca [H5], opublikowana w czasopiśmie *Physical Review Letters*, otrzymała wyróżnienie „Editors’ Suggestion”.

3.2.1. Natężenia linii: dwutlenek węgla

Podstawowy model widma cząsteczki zawiera informacje o położeniach i natężeniach linii widmowych, pomijając pozostałe parametry kształtu linii. Okazuje się jednak, iż nawet na tak podstawowym poziomie napotykamy istotne trudności, w szczególności w kwestii określenia natężeń linii z oczekiwaną promiłową dokładnością. Dane uzyskane metodami doświadczalnymi przez różne zespoły badawcze często są ze sobą niezgodne. Jeżeli dla danej linii dostępnych jest kilka wyników eksperymentalnych, względne różnice między nimi często wynoszą kilka procent. Dobrym przykładem jest widmo tlenu węgla. Zebrane, dostępne wyniki doświadczalne dla poszczególnych jego pasm można znaleźć w niedawnej pracy Meshkova i in.⁴⁸, gdzie w mierzonym przez wiele grup doświadczalnych pasmie (3 – 0), różnice pomiędzy poszczególnymi wynikami często przekraczają 2%, a czasami nawet 5%. Podobnie, wyniki uzyskane na drodze teoretycznej często są rozbieżne z wynikami doświadczalnymi.

Metody pomiarowe charakteryzujące się najwyższą dokładnością, zwykle są czasochłonne i w praktyce jest możliwe wykonanie pomiarów o wysokiej dokładności tylko dla ograniczonej liczby linii widmowych. Technika pomiarową umożliwiającą pomiary szerokopasmowe, często stosowaną w spektroskopii molekularnej, jest spektroskopia fourierowska. Jednak w technice tej istotne trudności wiążą się z poprawnym uwzględnieniem funkcji aparaturowej i wyznaczeniem dokładnej długości drogi absorpcji, co jest jedną z przyczyn rozbieżności między danymi literaturowymi.

Natomiast od strony teoretycznej poziom komplikacji nawet stosunkowo małych molekuł, takich jak tlenek czy dwutlenek węgla, zdecydowanie przekracza obecne możliwości prowadzenia obliczeń metodami *ab initio*. Teoretyczne obliczenia natężeń linii widmowych wymagają określenia powierzchni momentu dipolowego (DMS, ang. *dipole moment surface*) oraz powierzchni energii potencjalnej (PES, ang. *potential energy surface*). Obecnie możliwe są skuteczne obliczenia *ab initio* DMS⁴⁹, natomiast w przypadku PES lepsze wyniki od samodzielnych obliczeń *ab initio* daje wykorzystanie powierzchni półempirycznych⁵⁰.

W pracy [H1] pokazano wysoką skuteczność takiej metody: grupa z University College London (UCL) wykonała obliczenia natężeń linii widmowych dwutlenku węgla, które opierały się o DMS wyliczone metodami *ab initio* oraz dostępne w literaturze PES, uzyskane wspomnianą powyżej metodą⁵¹. Obliczone natężenia linii widmowych zostały porównane z wynikami pomiarów przeprowadzonych w NIST. Część doświadczalna pracy polegała na pomiarze natężeń 27 linii z pasma (30013) – (00001) cząsteczki dwutlenku węgla, zlokalizowanego w zakresie widmowym około 1.6 μm . Pomiary zostały wykonane techniką FS-CRDS (ang. *frequency-stabilized cavity ring-down spectroscopy*), czyli metodą spektroskopii strat we wnęce z aktywną stabilizacją długości

⁴⁸V. V. Meshkov et al., Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **280**, 108090 (2022).

⁴⁹L. Lodi et al., Journal of Chemical Physics **135**, 034113 (2011).

⁵⁰E. Zak et al., Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **177**, 31–42 (2016), I. I. Mizus et al., Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences **376**, 20170149 (2018).

⁵¹X. Huang et al., The Journal of Chemical Physics **136**, 124311 (2012).

wnęki optycznej z wykorzystaniem jako wzorca lasera o stabilizowanej częstotliwości - w tym przypadku helowo-neonowego. Różnicą w porównaniu z najbardziej typowym podejściem do spektroskopii FS-CRDS, było użycie modulatora elektro-optycznego (EOM) do przestawiania częstości wiązki, co znacznie przyspieszyło pomiary⁵². Natężenia badanych linii były, jak na technikę CRDS, stosunkowo wysokie i wynosiły między 8×10^{-25} cm/molecule i 2×10^{-23} cm/molecule. Z tego powodu w pomiarach została użyta próbka dwutlenku węgla w powietrzu. Konstrukcja wnęki optycznej była wykonana z elektro-polerowanej stali. Pomimo tego, były obserwowane efekty adsorpcji i desorpcji dwutlenku węgla na ściankach wnęki. Aby uniknąć związanych z tym zmian zawartości dwutlenku węgla w próbce, pomiary były wykonywane w warunkach przepływu gazu przez wnękę. Zostały również wykonane symulacje wpływu etalonów występujących w układzie pomiarowym na wyznaczone natężenia linii widmowych. Wyznaczone eksperymentalnie natężenia linii charakteryzowały się względnymi niepewnościami standardowymi między 0.1% i 1%, przy czym dla większości linii nie przekraczały one 0.2%.

Średnia, względna różnica między wynikami teoretycznymi i doświadczalnymi zaprezentowanymi w pracy wynosiła 0.33%, z niepewnością standardową 0.05%. Po raz pierwszy osiągnięta została tak dobra zgodność między zmierzonymi i przewidzianymi teoretycznie natężeniami molekularnych linii widmowych. Zgodność ta spełnia wymagania stawiane danym wykorzystywanym do interpretacji zdalnych pomiarów atmosferycznych. Był to pierwszy taki zestaw danych dla dwutlenku węgla, gdyż wykorzystywane wówczas dane referencyjne charakteryzowały się w większości względnymi niepewnościami standardowymi rzędu kilku procent⁵³. Boudjaar i in.⁵⁴ wyznaczyli natężenia linii z których większość ma przypisane subprocentowe niepewności standardowe, jednak wyznaczone przez nich wartości natężeń linii są wyraźnie wyższe od naszych wyników teoretycznych i doświadczalnych. Natomiast dostępne w literaturze dane o deklarowanych subprocentowych niepewnościach standardowych dla pasma (20012) – (00001) nie były ze sobą zgodne⁵⁵ i poza natężeniem jednej linii wyznaczonym przez Wübbelera i in.⁵⁶ nie były zgodne z naszymi wynikami teoretycznymi. Ważniejsze jednak od uzyskania tak dobrej zgodności teorii i doświadczenia dla jednej molekuly jest pokazanie, że taka metoda postępowania, czyli weryfikowanie obliczeń teoretycznych danymi doświadczalnymi o wysokiej dokładności, pozwala skutecznie przewidywać natężenia linii widmowych. Dokładność wyników uzyskanych dla innych pasm została później potwierdzona przez Odintsovą i in.⁵⁷, gdzie natężenia trzech linii z pasma (20012) – (00001) dwutlenku węgla ponownie na subprocentowym poziomie zgodziły się z wynikami obliczeń.

3.2.2. Pomiar położenia linii rozszerzonej dopplerowsko z kilohercową dokładnością

W pracy [H2] zostało wyznaczone położenie rozszerzonej dopplerowsko linii widmowej z pasma B tlenu molekularnego (linia P7 P7) względem atomowych wzorców częstotliwości: optycznego zegara atomowego na atomach strontu (⁸⁸Sr) o krótkoczasowej (1 s) względnej stabilności częstotliwości optycznej 4.3×10^{-14} oraz masera wodorowego (krótkoczasowa względna stabilność 10^{-12}). Ich długoczasowe względne stabilności wynoszą odpowiednio poniżej 10^{-16} oraz poniżej 10^{-15} . W pracy tej zademonstrowano eksperyment typu „proof-of-principle”, w którym po raz pierwszy jako wzorzec częstotliwości optycznej w spektroskopii molekularnej został wykorzystany optyczny zegar atomowy. Spektrometr CRDS został sprzężony z zegarem za pośrednictwem optycznego grzebienia częstotliwości, poprzez jednoczesne zdudnienie z grzebieniem optycznym wiązki próbującej spektrometru i wiązki z optycznego zegara atomowego. W układzie tym różnica częstotliwości między wiązką próbującą spektrometru i wiązką zegarową była wyznaczana przy pomocy optycznego grzebienia częstotliwości, dla którego częstotliwością wzorcową był sygnał radiowy z masera wodorowego przesyłany światłowodowo⁵⁸.

Położenie badanej linii zostało wyznaczone z niepewnością standardową 8.2 kHz, co odpowiada względnej niepewności standardowej 2×10^{-11} . Takie dokładności typowo otrzymywane są metodami spektroskopii bezdopplerowskiej (np. nasyceniowej). Również współczynnik zderzeniowego przesunięcia linii został wyzna-

⁵²G.-W. Truong et al., *Nature Photonics* **7**, 532–534 (2013).

⁵³K. Song et al., *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **111**, 332–344 (2010), B. Perevalov et al., *Journal of Molecular Spectroscopy* **252**, 190–197 (2008), L. Wang et al., *Journal of Molecular Spectroscopy* **234**, 84–92 (2005).

⁵⁴D. Boudjaadar et al., *Journal of Molecular Spectroscopy*, 158–167.

⁵⁵G. Wübbeler et al., *The Journal of Chemical Physics* **135**, 204304 (2011), G. Casa et al., *The Journal of Chemical Physics* **127**, 084311 (2007), G. Casa et al., *Journal of Chemical Physics* **130**, 184306 (2009).

⁵⁶G. Wübbeler et al., *The Journal of Chemical Physics* **135**, 204304 (2011).

⁵⁷T. A. Odintsova et al., *The Journal of Chemical Physics* **146**, 244309 (2017).

⁵⁸P. Morzyński et al., *Scientific Reports* **5**, 17495 (2015).

czony z sub-procentową dokładnością (względna niepewność standardowa 7×10^{-3}). Głównym ograniczeniem precyzji pomiarów była stabilność wnęki optycznej, nie wzorcowych częstotliwości. W pracy pokazano, że użycie tylko sygnału z masera wodorowego, bez wykorzystania zegara optycznego, prowadziłoby do wyników o dwa rzędy wielkości mniej precyzyjnych, gdyby nie występowały ograniczenia wynikające ze stabilności wnęki optycznej.

Uzyskanie tak małych niepewności położenia linii było możliwe dzięki zastosowaniu stabilnego wzorca częstotliwości oraz długotrwałemu uśrednianiu widm. Skutkiem tych prac była budowa nowej wersji spektrometru. Jej działanie zostało w pełni pokazane w pracy [H3].

Pomiary nasyceniowe, które wydają się naturalną i prostszą drogą do uzyskania położenia linii z porównywalną dokładnością, w spektroskopii molekularnej są z powodzeniem prowadzone dla linii widmowych o większych natężeniach. Jednak linie widmowe z pasma B tlenu są stosunkowo słabe. Są one wynikiem przejść magnetycznych-dipolowych, nie elektrycznych-dipolowych, i charakteryzują się natężeniami poniżej 6×10^{-25} cm/molecule. Tego typu linie do tej pory nie były mierzone metodami spektroskopii nasyceniowej, gdyż ich nasycenie wymaga wysokiej mocy wiązki pompującej. Pierwsze próby przeprowadzenia pomiarów nasyceniowych w paśmie B tlenu zostały ostatnio przeprowadzone w Instytucie Fizyki UMK w Toruniu przy moim udziale. Prowadziły one do uzyskania wartości położenia linii scharakteryzowanych niepewnościami standardowymi o wartościach bezwzględnych między 10 kHz i 20 kHz, zatem w chwili obecnej nie są one konkurencyjne dla pomiarów prowadzonych dla linii rozszerzonej dopplerowsko, zaprezentowanych w tej pracy.

3.2.3. Jednoczesna obserwacja efektów zależności od prędkości i zwiężenia Dickego w paśmie B tlenu

Po wykonaniu pomiarów przedstawionych w pracy [H2], układ pomiarowy został istotnie przebudowany. Został wymieniony laser służący do stabilizacji długości wnęki optycznej spektrometru. Zostały rozdzielone wiązka próbkująca i lokująca, co pozwoliło uzyskać układ pomiarowy podobny do opisanego w pracy Cygan i in.⁵⁹. W konsekwencji badań przeprowadzonych przy moim udziale i opisanych w pracy [22] został przebudowany układ elektryczny służący do wyłączenia wiązki podczas rejestracji zaników światła. W ten sposób został zwiększony współczynnik *extinction ratio*, czyli stosunek mocy wiązki próbkującej pompującej wnękę optyczną do resztkowej mocy obecnej w układzie po jej wyłączeniu, co poprawiło dokładność wyznaczanych stałych zaniku [22]. Został również zbudowany układ aktywnej stabilizacji temperatury wnęki optycznej. Przebudowany spektrometr został wykorzystany w części pomiarów zaprezentowanych w pracy [24], jednak jego możliwości po raz pierwszy zostały w pełni wykorzystane w pracy [H3].

W pracy [H3] przedstawione zostały wyniki pomiarów kształtu samozaburzonych linii widmowych z pasma B tlenu, w zakresie niskich ciśnień: do 22 Torr (2.9 kPa) w przypadku linii P1 P1 oraz poniżej 10 Torr (1.3 kPa) w przypadku linii P7 P7 oraz P9 P9. We wcześniejszych pracach dotyczących kształtu linii z pasma B tlenu, w zakresie niskich ciśnień, profilem oddającym kształt linii w wystarczającym stopniu był SDVP [20]. W pracy [H3] uzyskano stosunek sygnału do szumu nawet ośmiokrotnie wyższy w porównaniu z wcześniejszymi pomiarami⁶⁰ tych samych linii z gałęzi P. Otrzymane w ten sposób kształty mierzonych linii nie mogą być opisane przy pomocy profilu SDVP. Najprostszym profilem, który wystarczająco dobrze oddaje kształt tych linii jest SDNGP. Oznacza to, iż jednocześnie były obserwowane efekty zależności od prędkości oraz zwiężenie Dickego.

Wykonano szczegółową analizę systematycznych niepewności parametrów kształtu linii. W szczególności oprócz pomiarów techniką CRDS, zostały przeprowadzone pomiary techniką CMWS. Stosunek sygnału do szumu widm otrzymanych techniką CMWS jest wyraźnie niższy, jednak zostały one wykorzystane do oszacowania niepewności otrzymanych parametrów kształtu linii. Korzystając z wyników otrzymanych techniką CMWS pokazano również, że niepewność wprowadzona przez ewentualną nieliniowość systemu detekcji w technice CRDS jest nieistotna w porównaniu z pozostałymi źródłami niepewności. Wniosek ten opiera się na symulacjach, które uwzględniły dwa różne modele nieliniowości systemu detekcji. Przy pomocy symulacji pokazano, że w przypadku obydwóch prawdopodobnych typów nieliniowości, pomiary technikami CRDS i CMWS powinny prowadzić do natężenia linii obciążonego błędem systematycznym o przeciwnym znaku. Stąd, na podstawie porównania otrzymanych natężeń linii stwierdzono, że wpływ ewentualnej nieliniowości na wyniki jest nieistotny. Wniosek ten jest szczególnie ważny z punktu widzenia techniki CRDS, która opiera się na dokładnym wyznaczaniu bardzo krótkich stałych zaniku (w przedstawianym układzie $\tau \leq 13 \mu\text{s}$). Pokazano, iż

⁵⁹A. Cygan et al., Journal of Chemical Physics **144**, 214202 (2016).

⁶⁰S. Wójtewicz et al., Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **144**, 36–48 (2014).

po wprowadzeniu w układzie spektrometru przedstawionych powyżej zmian, możliwe jest wyznaczanie położenia linii z niepewnościami standardowymi z przedziału między 20 kHz i 30 kHz bez długotrwałego uśredniania widm, które było potrzebne w pracy [H2]. Ponadto zaobserwowano systematyczne różnice w porównaniu z wynikami wcześniejszych pomiarów natężeń linii z pasma B tlenu uzyskanych w naszym laboratorium, które prawdopodobnie są wynikiem wcześniejszych nieszczelności układu dostarczającego gaz do spektrometru. Otrzymano natężenia linii z względnymi niepewnościami standardowymi na poziomie 0.2%.

W pracy tej zaobserwowano również efekt zmiany współczynnika odbicia zwierciadeł wneki oświetlanych wiązką o stosunkowo wysokiej mocy, który można powiązać z absorpcją światła w zwierciadłach. W pracy pokazano, że przy odpowiednim doborze warunków pomiarowych uzyskane wyniki nie są obciążone dodatkową niepewnością związaną z absorpcją światła w zwierciadłach.

3.2.4. Spektroskopia nasyceniowa: wyznaczanie położenia linii z sub-kilohercową dokładnością

W pracy [H2] zostało wyznaczone położenie rozszerzonej dopplerowsko linii widmowej z niepewnością standardową kilku kHz. Kolejnym krokiem w zwiększaniu dokładności jest przejście do pomiarów metodami spektroskopii bezdopplerowskiej. W pracy [H4], która otrzymała wyróżnienie „Editor’s pick”, została zaprezentowana nowa metoda dyspersyjnych pomiarów nasyceniowych, czyli pomiarów tzw. dipów Lamba. Jest to pierwsza realizacja pomiarów nasyceniowych przy użyciu techniki CMDS. W pracy tej również po raz pierwszy została wykorzystana w pomiarach nasyceniowych technika CMWS, oraz technika CRDS, która wielokrotnie już była używana w pomiarach nasyceniowych we wnece optycznej.

Pokazano, że wbrew oczekiwaniom technika CRDS zastosowana do pomiarów w warunkach nasycenia może prowadzić do niedokładnych wyników. Jest to spowodowane jej wrażliwością na fluktuacje mocy wiązki nasycającej. Podobny problem zaobserwowano w przypadku pomiarów techniką CMWS, gdzie wyniki okazały się jeszcze mniej dokładne. Natomiast wyniki uzyskane techniką CMDS charakteryzowały się najwyższą dokładnością, podobnie jak ma to miejsce w przypadku pomiarów linii rozszerzonych dopplerowsko [23]. Również podobnie jak w pomiarach dopplerowskich, technika CMDS oferuje największy zakres dynamiczny spośród rozważanych trzech technik. Przewaga techniki CMDS nad technikami CRDS oraz CMWS wynika z niewrażliwości obwiedni dyspersyjnego profilu rozszerzonego dopplerowsko na efekt nasycenia w przypadku, gdy szerokość jednorodna linii jest bardzo mała w porównaniu z szerokością dopplerowską⁶¹. Natomiast w technikach absorpcyjnych (np. CRDS, CMWS) zmiana mocy wiązki pompującej prowadzi do asymetrii obwiedni dopplerowskiej i tym samym rejestrowanego dipu Lamba. Skutkuje to zmianą jego wyznaczonego położenia, co nie ma miejsca w pomiarach dyspersyjnych techniką CMDS.

Zostały przeprowadzone pomiary dla dwóch linii z pasma (3 – 0) tlenku węgla. Prowadziły one do uzyskania położenia linii z niepewnościami standardowymi poniżej 0.5 kHz, co jest obecnie najdokładniejszym wynikiem dla tych linii. Praca wpisuje się w dyskusję na temat przesunięcia ciśnieniowego linii mierzonego w warunkach nasycenia. W pracy Wanga i in.⁶², w której również była mierzona metodą nasyceniową jedna z linii rozważanych w pracy [H4], nie zaobserwowano przesunięcia ciśnieniowego. Z drugiej strony istnieją prace pokazujące, że w przeciwieństwie do pomiarów w warunkach rozszerzenia dopplerowskiego i stosunkowo wysokich ciśnień, gdzie przesunięcie linii zmienia się liniowo z ciśnieniem, w warunkach nasycenia zależność ta może być nieliniowa⁶³. Ponadto, często stosowanym podejściem w wyznaczaniu niezaburzonego położenia linii w pomiarach nasyceniowych jest wykonanie pomiaru tylko w jednym ciśnieniu, a następnie wyznaczenie niezaburzonego położenia linii w oparciu o współczynnik jej ciśnieniowego przesunięcia pochodzący z pomiarów linii rozszerzonych dopplerowsko⁶⁴. W badanym w pracy [H4] zakresie ciśnień, w warunkach nasycenia, zaobserwowano wyraźne przesunięcie ciśnieniowe linii w warunkach nasycenia. Jednocześnie, nie zaobserwowano wyraźnych odstępstw od liniowej zależności położenia linii od ciśnienia, a wyznaczona wartość współczynnika ciśnieniowego przesunięcia linii wprawdzie jest mniejsza o około 40% od wartości literaturowych pochodzących z pomiarów dopplerowskich⁶⁵, jednak względna niepewność standardowa tych wyników jest bliska 30%.

⁶¹W. Ma et al., *Journal of the Optical Society of America B* **25**, 1144–1155 (2008).

⁶²J. Wang et al., *Journal of Chemical Physics* **147**, 091103 (2017).

⁶³S. N. Bagaev and V. P. Chebotaev, *Soviet Physics Uspekhi* **29**, 82–103 (1986).

⁶⁴J. Burkart et al., *Journal of Chemical Physics* **142**, 191103 (2015).

⁶⁵N. Picqué and G. Guelachvili, *Journal of Molecular Spectroscopy* **185**, 244–248 (1997).

3.2.5. Promilowa dokładność wyznaczenia natężeń linii: tlenek węgla

We wspomnianej już pracy [23] pokazano, że technika CMDS umożliwia znacznie dokładniejsze pomiary natężeń linii widmowych niż technika CRDS w jej standardowych realizacjach. Zaprezentowane w pracy wyniki sugerowały, że możliwe jest uzyskanie promilowych dokładności. W celu potwierdzenia tak dobrej dokładności pomiarów, zostały wykonane badania przedstawione w pracy [H5], która otrzymała wyróżnienie „Editors’ Suggestion”. W tym celu została nawiązana współpraca z wiodącymi grupami metrologii optycznej z National Institute of Standards and Technology (NIST, USA) i Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB, Niemcy) oraz grupą teoretyków z UCL, zajmującą się m.in. obliczeniami natężeń linii widmowych. Jako obiekt doświadczalny wybraliśmy cząsteczkę tlenku węgla, która jest jedną z kluczowych molekuł dla badań atmosfery.

Grupa teoretyków z UCL przeprowadziła obliczenia natężeń linii widmowych dla cząsteczki $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$. Cząsteczka tlenku węgla ma prostszą strukturę od cząsteczki dwutlenku węgla badanej w pracy [H1], stąd możliwe są dokładniejsze obliczenia. Powierzchnie momentu dipolowego zostały wyznaczone w obliczeniach *ab initio* natomiast powierzchnie energii potencjalnej były funkcjami półempirycznymi⁶⁶.

Podobnie jak w przypadku obliczeń, cząsteczka tlenku węgla jest dobrym obiektem doświadczalnym. Przeprowadzenie dokładnych pomiarów jest łatwiejsze niż w przypadku cząsteczki dwutlenku węgla ze względu na mniej skomplikowaną strukturę widma oraz mniejszą liczbę linii sąsiadujących z badanymi przejściami, a pochodzących od innych izotopologów. Ponadto, w przypadku tlenku węgla adsorpcja i desorpcja na powierzchni stalowej komórki absorpcyjnej jest na poziomie niewykrywalnym w naszej konfiguracji eksperymentu, natomiast w przypadku dwutlenku węgla (praca [H1]) była ona istotnym ograniczeniem.

Część doświadczalna pracy została wykonana niezależnie w trzech laboratoriach, i dotyczyła pomiarów natężeń linii z pasma (3 – 0) tlenku węgla. Stosunkowo silne linie zostały zmierzone metodą spektroskopii fourierowskiej (FTS) w PTB⁶⁷. Ponadto wybranych zostało siedem słabszych linii, które zostały niezależnie zmierzone w dwóch laboratoriach: w Instytucie Fizyki UMK metodą CMDS, oraz w NIST techniką CRDS z wykorzystaniem kalibrowanego przetwornika analogowo-cyfrowego w celu zredukowania nieliniowości układu detekcji⁶⁸. W przypadku wszystkich pomiarów, względne niepewności standardowe natężeń linii nie przekraczają 2%, a w niektórych przypadkach wynoszą poniżej 1%. Względne różnice między natężeniami wyznaczonymi w pomiarach przeprowadzonych na UMK oraz w NIST wynoszą około 1%, jedynie dla najsłabszej mierzonej linii, P30, różnica ta jest większa. Po raz pierwszy uzyskano tak dobrą zgodność wyników pomiarów natężeń linii widmowych pochodzących z różnych laboratoriów i wykonanych istotnie różnymi technikami: absorpcyjną i dyspersyjną.

Wszystkie wyniki pomiarów zostały porównane z wynikami obliczeń teoretycznych. Średnia, względna różnica między doświadczalnymi i teoretycznymi natężeniami linii wynosi 0.6%, a jej niepewność standardowa 0.9%. Po raz pierwszy uzyskano tak dobrą zgodność między doświadczalnymi i teoretycznymi wartościami natężeń molekularnych linii widmowych. Zastosowanie różnych technik pomiarowych, charakteryzujących się optymalnym działaniem dla linii o istotnie różnych natężeniach, pozwoliło na porównanie z teorią natężeń linii z szerokiego zakresu wartości, co odpowiada szerokiemu zakresowi energii rotacyjnych w stanie dolnym. Porównanie z teorią pozwala pośrednio stwierdzić, że pomiary wykonane techniką FTS również są zgodne na promilowym poziomie z pomiarami wykonanymi w pozostałych laboratoriach. Także w tym przypadku, jest to niespotykana w literaturze zgodność. W pracy pokazano, że zgodność tych pomiarów z wynikami teoretycznymi jest o ponad rząd wielkości lepsza niż w przypadku dostępnych w literaturze danych dla pasma (3 – 0). Pokazano również porównanie z danymi dostępnymi w powszechnie używanej bazie HITRAN⁶⁹. Pokazano, że o ile nowe wyniki są zgodne z bazą HITRAN dla stosunkowo wysokich wartości liczby kwantowej J w gałęzi R, dla niskich wartości oraz w gałęzi P, obserwowane są różnice istotnie przekraczające 1%. Podobnie, istotna jest różnica między naszymi wynikami teoretycznymi oraz najnowszymi wartościami literaturowymi dla tego pasma, które oparte są o półempiryczne obliczenia przeprowadzone z wykorzystaniem dostępnych danych eksperymentalnych dla pięciu różnych pasm absorpcyjnych tlenku węgla⁷⁰.

⁶⁶J. A. Coxon and P. G. Hajigeorgiou, *The Journal of Chemical Physics* **121**, 2992–3008 (2004).

⁶⁷V. Werwein et al., *Applied Optics* **56**, E99 (2017).

⁶⁸A. J. Fleisher et al., *Physical Review Letters* **123**, 043001 (2019).

⁶⁹I. Gordon et al., *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **277**, 107949 (2022).

⁷⁰V. V. Meshkov et al., *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **280**, 108090 (2022).

3.2.6. Podsumowanie osiągnięcia

Podsumowując, moje prace badawcze prowadziły do otrzymywania precyzyjnych i dokładnych wartości parametrów kształtu linii widmowych. Są to przede wszystkim natężenia i położenia linii, jak również parametry zderzeniowe niezbędne do poprawnej symulacji widm. Na osiągnięcie składają się w szczególności:

1. Rozwój układów eksperymentalnych i technik pomiarowych, prowadzący do redukcji niepewności systematycznych. Zaproponowałam nową, dyspersyjną metodę pomiarową w spektroskopii nasyceniowej i pokazałam, iż daje ona dokładniejsze wyniki od powszechnie stosowanej techniki absorpcyjnej.
2. Pokazanie, iż technika pomiarów dyspersyjnych umożliwia pomiary natężeń linii widmowych z promilowymi względnymi niepewnościami standardowymi, a w warunkach spektroskopii nasyceniowej - położenia linii z subkilohercową dokładnością.
3. Współpraca z grupą teoretyczną w celu otrzymania parametrów, tutaj natężeń linii, w szerokim zakresie widmowym, uwzględniającym linie i pasma spoza zakresu badanego doświadczalnie. Po raz pierwszy wyniki pomiarów natężeń linii widmowych, wykonane różnymi technikami w różnych laboratoriach, zgadzają się ze sobą oraz z wynikami teoretycznymi na promilowym i subpromilowym poziomie, czyli o rząd wielkości lepiej niż w przypadku większości dostępnych w literaturze danych.
4. Dokładne, nawet na poziomie subkilohercowym, wyznaczenie położenia linii widmowych w celu dostarczenia danych, które mogą być wykorzystane w badaniach podstawowych koncepcji.
5. Wyznaczanie dokładnych parametrów kształtu linii widmowych potrzebnych w najbardziej wymagających zdalnych obserwacjach atmosfery ziemskiej, ze szczególnym uwzględnieniem natężeń linii, wraz z określeniem systematycznych przyczynków do niepewności poszczególnych parametrów. W szczególności został oszacowany wpływ nieliniowości układu detekcji w spektrometrze typu CRDS, który często w takich szacowaniach jest pomijany.
6. Wprowadzenie do spektroskopii molekularnej optycznego zegara atomowego jako wzorca częstotliwości dla pomiarów położenia linii widmowych.

3.3. Pozostałe osiągnięcia

3.3.1. Prężność par nasyconych lodu

W pracy [9] została zaproponowana nowa metoda pomiaru zależności prężności par nasyconych lodu od temperatury. Do spektrometru typu FS-CRDS został podłączony generator pary wodnej, czyli pokryty lodem saturator, który służył do kalibracji higrometrów w NIST (NIST Primary Standard Humidity Generator). Jego temperatura była jednorodna, stabilna i znana z milikelwinową dokładnością. Saturator ten był źródłem próbki, jaką był gazowy azot nasycony parą wodną w temperaturze odpowiadającej temperaturze lodu. Następnie, spektrometrem FS-CRDS była mierzona absorpcja odpowiadająca określonej linii widmowej pary wodnej. Linie te były dobierane w zależności od zawartości pary wodnej w próbce tak, aby uzyskać optymalne z punktu widzenia spektrometru wartości absorpcji, dające najwyższą dokładność pomiaru. Znajomość przybliżonych bezwzględnych wartości natężeń linii widmowych wody była potrzebna tylko na etapie planowania eksperymentu, jednak nie były one wykorzystywane do wyznaczenia prężności par lodu. Ważną zaletą takiego podejścia jest niezależność pomiaru od dokładności przyjętych natężeń linii widmowych. Istotne były tylko ich względne natężenia, które zostały w tych pomiarach wyznaczone. Pomiary zostały wykonane względem dokładnie znanej wartości prężności pary nasyconej lodu w punkcie potrójnym wody⁷¹. Wartość ta jest znana z względną niepewnością standardową 5×10^{-6} .

Wcześniejsze badania nad zależnością prężności par nasyconych lodu od temperatury były prowadzone różnymi technikami. W literaturze przedmiotu można znaleźć zarówno dane doświadczalne, jak i zależności analityczne otrzymywane na podstawie analizy danych doświadczalnych lub obliczeń termodynamicznych. Obliczenia te różnią się między sobą przede wszystkim założeniami odnośnie zależności ciepła sublimacji od temperatury oraz traktowaniem pary wodnej jak gazu doskonałego lub uwzględnieniem odpowiednich poprawek

⁷¹L. A. Guildner et al., Science **191**, 1261–1261 (1976).

pozwalających zastosować model gazu bliższy rzeczywistości. Porównanie danych literaturowych pokazywało, iż rozrzuty danych doświadczalnych są o rząd wielkości większe niż różnice pomiędzy krzywymi teoretycznymi. W szczególności dostępne dane doświadczalne nie pozwalały, ze względu na małą dokładność, na weryfikację obliczeń termodynamicznych.

W pracy [11] zaprezentowano wyniki pomiarów zależności prężności pary nasyconej lodu od temperatury dla temperatur z zakresu od 175 K do 253 K, przeprowadzonych powyżej opisaną metodą. Charakteryzują się one sub-procentowymi niepewnościami standardowymi (poniżej 0.5% w większości badanego zakresu temperatur). Stanowią one pierwszy zestaw danych doświadczalnych, który umożliwił weryfikację powszechnie używanych wyrażeń analitycznych opisujących zależność prężności par lodu od temperatury. Wyniki w szczególności pozwoliły stwierdzić, że funkcja rekomendowana w pracy Wagnera i in.⁷² oraz przez IAPWS (International Association for the Properties of Water and Steam)⁷³ w zakresie temperatur poniżej 200 K znacznie lepiej oddaje przebieg tej zależności niż krzywa rekomendowana przez WMO (World Meteorological Organization)⁷⁴. Wyniki przedstawione w pracach [9,11] były podstawą mojej rozprawy doktorskiej.

3.3.2. Rozwój technik spektroskopowych

Istotną część mojej dotychczasowej pracy była poświęcona rozwojowi technik spektroskopowych wykorzystujących wnęki optyczne, w szczególności techniki CRDS. Poza elementami wprowadzonymi w spektrometrach wykorzystywanych w pracach [H1-H5], uczestniczyłam w budowie pierwszego w Polsce spektrometru typu FS-CRDS [5], a następnie w pracach, które prowadziły do powstania kolejnych jego wersji. W szczególności uczestniczyłam w pracach nad dowiązaniem techniką PDH (Ponda-Drevera-Halla)⁷⁵ wiązki próbującej spektrometru do częstotliwości rezonansowej wnęki optycznej. W pracy [6] pokazano, iż dowiązanie takie prowadzi do istotnego zwiększenia stosunku sygnału do szumu rejestrowanych widm (o czynnik około 3), i tym samym umożliwia dokładniejsze wyznaczanie parametrów kształtu linii widmowych. W pracy [12] przedstawiono szczegółowe porównanie techniki FS-CRDS z oraz bez dowiązania techniką PDH. W pracy [22] spektrometr ten został wykorzystany w układzie, w którym wiązka lokująca, służąca do dowiązania techniką PDH częstotliwości lasera do częstotliwości modu rezonansowego wnęki, oraz wiązka próbująca, służąca do pomiaru absorpcji próbki, zostały rozdzielone. W pracy tej pokazano wpływ odstrojenia wiązki próbującej od rezonansu wnęki oraz jej niecałkowitego wyłączenia na wyznaczaną stałą zaniku, i tym samym absorpcję. Pokazano, iż niecałkowite wyłączenie wiązki oraz jej odstrojenie od położenia modu rezonansowego wnęki prowadzą do nieeksponencjalnych zaników natężenia światła, co może prowadzić do systematycznego błędu dochodzącego nawet do 0.5% wartości stałej zaniku i w konsekwencji do błędów systematycznych w wyznaczanych na jej podstawie widmach. Przeanalizowano odpowiedź wnęki optycznej na nierezonansowe wzbudzenie, co zaowocowało nową metodą pomiarową⁷⁶.

Uczestniczyłam w pracach, które doprowadziły do pokazania iż metoda pomiarów dyspresyjnych, CMDS, jest dokładniejsza od techniki CRDS. Technika CMDS została zaproponowana przez Cygan i in.⁷⁷. Pomimo iż od początku była techniką obiecującą⁷⁸, dopiero w pracy [23] została dopracowana i możliwe było pokazanie jej przewagi nad powszechnie stosowaną techniką CRDS oraz również nową techniką CMWS⁷⁹. Pokazano, iż technika CMDS charakteryzuje się najwyższą dokładnością spośród tych trzech technik i jednocześnie daje dokładne wyniki w najszerszym zakresie dynamicznym. Moja rola w tej pracy polegała na przygotowaniu części oprogramowania sterującego eksperymentem.

Brałam udział w prezentacji techniki pomiarów absorpcyjnych z wykorzystaniem dwóch optycznych grzebieni częstotliwości wytworzonych przy użyciu modulatorów Macha-Zehndera z lasera o pracy ciągłej [16]. W tym układzie kluczowe jest dokładne dowiązanie fazowe grzebieni do wnęki optycznej, co było moją

⁷²W. Wagner et al., *Journal of Physical and Chemical Reference Data* **40**, 043103 (2011).

⁷³*Revised release on the pressure along the melting and sublimation curves of ordinary water substance* (The International Association for the Properties of Water and Steam, 2008).

⁷⁴*Guide to meteorological instruments and methods of observation* (World Meteorological Organization, 2008).

⁷⁵R. W. P. Drever et al., *Applied Physics B* **31**, 97–105 (1983).

⁷⁶A. Cygan et al., *Communications Physics* **4**, 14 (2021).

⁷⁷A. Cygan et al., *Optics Express* **23**, 14472–14486 (2015).

⁷⁸A. Cygan et al., *Journal of Chemical Physics* **144**, 214202 (2016), A. Cygan et al., *Measurement Science and Technology* **27**, 045501 (2016).

⁷⁹A. Cygan et al., *Optics Express* **21**, 29744–29754 (2013), D. A. Long et al., *Applied Physics B: Lasers and Optics* **114**, 489–495 (2014).

rolą w tych badaniach. Zaletą tej techniki, w porównaniu z wykorzystaniem dwóch niezależnych grzebieni częstotliwości opartych o lasery femtosekundowe, jest większa moc optyczna w pojedynczym zębie oraz kontrola nad względnym odstrojeniem grzebieni bez konieczności loku fazowego między nimi. Układ pomiarowy umożliwił rejestrację widma o szerokości około 4 GHz w czasie kilku mikrosekund.

W pracy [15] została zaproponowana nowa technika pomiarowa, w której wykorzystywany jest różnicowy pomiar absorpcji techniką CRDS. Umożliwia on zredukowanie wpływu tzw. etalonów na widmo. Są to periodyczne struktury, które pojawiają się jako tło widma. Obecność etalonów wynika z istnienia w układzie pasożytniczych wnęk optycznych, powstających gdy jakaś słabo odbijająca powierzchnia (np. soczewki lub detektora) jest równoległa do zwierciadła wnęki rezonansowej spektrometru. Ich istnienie powoduje efektywną zmianę mierzonego współczynnika odbicia zwierciadeł wnęki i tym samym jej *finesse*⁸⁰. Pokazano, iż stosując pomiar różnicowy można otrzymać widma o znacznie wyższym parametrze jakości dopasowania, QF. Pomimo, iż zwiększa się w ten sposób szum, ze względu na redukcję efektów systematycznych możliwe jest efektywne uśrednianie widm. W ten sposób uzyskano widmo o stosunku sygnału do szumu, $SNR \approx 1.7 \times 10^5$, porównywalnym do najwyższych wartości uzyskiwanych w tym czasie w spektroskopii molekularnej⁸¹ przy uśrednieniu w przybliżeniu dziesięciokrotnie mniejszej liczby widm niż w cytowanej pracy. Dla porównania, w przypadku standardowych pomiarów techniką CRDS, uzyskano $SNR \approx 7 \times 10^4$ przy uśrednieniu takiej samej liczby zarejestrowanych widm. Wynik ten uzyskano stosując pomiar dwukanałowy, w którym pomiar absorpcji w punktach widma odległych o $\Delta\nu$ następował bezpośrednio, jeden po drugim. Efekt poprawy jakości widm można również uzyskać traktując widmo zmierzone standardowo jako różnicowe, co prowadzi do jednokanałowego pomiaru różnicowego. Wówczas jednak poprawa jest mniej wyraźna, co wynika z różnej dynamiki tych pomiarów.

3.3.3. Badanie wpływu efektów zderzeniowych na kształt linii widmowych

Uczestniczyłam w szeregu prac poświęconych wyznaczaniu parametrów kształtu linii widmowych cząsteczek ważnych z punktu widzenia badań atmosfery ziemskiej, w szczególności tlenu w paśmie B. Pasma B tlenu jest drugim pod względem natężenia pasmem w czerwonej części widma cząsteczki tlenu. Jest ono wykorzystywane, obok pasma A, w zdalnych pomiarach atmosfery ziemskiej. Jest wprawdzie około 15 razy słabsze od pasma A, jednak wykorzystywane razem z pasmem A pozwala zwiększyć dokładność pomiarów. Przed rokiem 2010, dokładne wartości parametrów linii z tego pasma nie były znane. We wcześniejszych pracach doświadczalnych wyznaczane były tylko niektóre ich parametry: tylko natężenia i szerokości⁸², przesunięcia ciśnieniowe⁸³, położenia i natężenia⁸⁴, rozszerzenia i przesunięcia⁸⁵. W bazie danych HITRAN, w edycji z roku 2012⁸⁶, znajdowały się nowe dane z pracy Gordona i in.⁸⁷. Niepewność natężeń linii była określona na 5 do 10%, przy oczekiwaniach dokładności na poziomie subprocentowym. W Instytucie Fizyki UMK od roku 2010 trwały prace doświadczalne, równoległe do prac and rozwojem techniki pomiarów CRDS, które doprowadziły do uaktualnienia stanu wiedzy o paśmie B tlenu. Do tej pory zostały wyznaczone parametry ponad 60 samozaburzonych linii z tego pasma. We wcześniejszych pracach doświadczalnych parametry kształtu tych linii były wyznaczane z dopasowań profilu Voigta. Natomiast w pracach, które powstawały w Instytucie Fizyki UMK systematycznie pokazywano, iż profil ten nie opisuje poprawnie kształtu linii pasma B tlenu. Najprostszym profilem poprawnie opisującym ich kształt w zastosowanych warunkach pomiarowych jest SDVP, natomiast w przypadku pomiarów o najwyższym stosunku sygnału do szumu (rzędu 4×10^4), pomimo niskiego zakresu ciśnień (około 1 kPa), takim profilem jest zależny od prędkości profil Nelkina-Ghataka [H3]. Również w przypadku słabych linii, mierzonych w stosunkowo wysokim zakresie ciśnień, konieczne jest użycie profilu SDNGP [24]. Uczestniczyłam w większości prac nad wyznaczeniem parametrów kształtu linii z pasma B [5,14,18,20,24], w szczególności obejmujących pomiary w gałęzi R tego pasma. Ostatnio wykazaliśmy również występowanie szczególnie silnego efektu mieszania linii w paśmie B [27].

Zajmowałam się pomiarami kształtu linii dwutlenku węgla. W pracy [7] badany był kształt linii R16 z pasma (30012) – (00001) w mieszaninie gazów o składzie zbliżonym do powietrza. Pokazano równoczesne występowanie

⁸⁰J. Courtois and J. T. Hodges, *Optics Letters* **37**, 3354 (2012).

⁸¹A. Cygan et al., *Physical Review A* **85**, 022508 (2012).

⁸²L. P. Giver et al., *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **14**, 793–802 (1974).

⁸³A. J. Phillips and P. A. Hamilton, *Journal of Molecular Spectroscopy* **174**, 587–594 (1995).

⁸⁴S.-L. Cheah et al., *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **64**, 467–482 (2000).

⁸⁵J. E. Barnes and P. B. Hays, *Journal of Molecular Spectroscopy* **216**, 98–104 (2002).

⁸⁶L. S. Rothman et al., *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **130**, 4–50 (2013).

⁸⁷I. E. Gordon et al., *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **112**, 2310–2322 (2011).

efektów zależności od prędkości oraz zwięzienia Dicke'go jak również fakt, iż zaniedbanie efektów zwięzienia linii może prowadzić do istotnych błędów systematycznych - użycie profilu Voigta prowadzi do natężenia linii, które może różnić się nawet o 2% od wyznaczonego w pracy [7]. Wybór linii podyktowany był zapotrzebowaniem wynikającym ze zdalnych pomiarów atmosferycznych, w szczególności planowanym wówczas przez NASA programem monitorowania dwutlenku węgla w atmosferze ASCENDS (ang. *Active Sensing CO₂ Emissions over Nights Days and Seasons*)⁸⁸.

W pracy [13] pokazano natomiast wpływ składu próbki na działanie dostępnych komercyjnie instrumentów służących m.in. do pomiaru zawartości CO₂, których działanie opiera się o technikę CRDS. W pracy porównano wyniki otrzymywane przy użyciu komercyjnych spektrometrów CRDS oraz urządzeń opartych o metody chromatograficzne z pomiarami przeprowadzonymi w warunkach laboratoryjnych, z wykonaną pełną analizą danych. Pokazano, że zmienna zawartość argonu w próbce powoduje systematyczne błędy w wynikach otrzymywanych przy użyciu komercyjnych spektrometrów CRDS, których działanie opiera się o pomiar maksymalnej absorpcji, nie profilu kształtu linii tak jak w pomiarach laboratoryjnych. Wykazano w szczególności, iż do kalibracji takich komercyjnych urządzeń konieczne jest użycie próbek syntetycznego powietrza zawierającego argon i rekomendowano używanie do kalibracji naturalnych próbek wzorcowego powietrza w celu redukcji błędów systematycznych.

3.3.4. Optyczny zegar atomowy: ultrastabilny laser

W Toruniu powstał pierwszy w Polsce optyczny zegar atomowy [10,17], w którego budowie uczestniczyłam. Pracowałam przy konstrukcji stabilnego, spektralnie wąskiego lasera, który w układzie zegara optycznego służy do chłodzenia optycznego atomów strontu. Został zbudowany układ oparty o laser typu ECDL. Dwa lasery o szerokościach spektralnych poniżej 200 kHz oraz poniżej 1 MHz zostały zawężone techniką PDH. W tym celu wykorzystano dwie, niezależne, specjalnie zaprojektowane, stabilne wnęki optyczne wykonane ze szkła o bardzo małym współczynniku rozszerzalności termicznej (ULE, ang. *ultra-low expansion*). Dzięki zbudowaniu układu dwóch zawężonych laserów, możliwe było określenie ich szerokości na podstawie sygnału dudnień optycznych. Przy założeniu równych szerokości spektralnych, szerokość każdego z nich wynosiła około 8.4 Hz [8]. Układ ten był również wykorzystywany w konfiguracji, w której jeden z laserów był dowiązany techniką PDH do wnęki, a następnie do niego drugi laser był dowiązywany fazowo. W ten sposób powstał przestrajalny system laserowy, umożliwiający pomiary wąskich struktur, takich jak linia $^1S_0 - ^3P_1$ wykorzystywana w zegarze optycznym, charakteryzująca się szerokością naturalną poniżej 7 kHz. Laser ten był również wykorzystywany do pomiaru bezwzględnej częstotliwości lasera próbującego w spektrometrze CRDS [14]. Natomiast w pracy [4] zostały wyznaczone, teoretycznie i doświadczalnie, współczynniki ciśnieniowego przesunięcia i rozszerzenia tej linii, zaburzonej przez gazy szlachetne, w zakresie niskich ciśnień. W odróżnieniu od większości moich publikacji, w tym przypadku mój wkład polegał na wyznaczeniu teoretycznych wartości tych współczynników.

Toruński optyczny zegar atomowy, później rozbudowany do układu dwóch zegarów, był wykorzystywany w szeregu prac wychodzących tematycznie poza fizykę atomową. W szczególności był wykorzystany do poszukiwania ciemnej materii. Prace te, prowadzone przy użyciu toruńskich zegarów⁸⁹ oraz globalnej sieci zegarów optycznych zegarów atomowych⁹⁰ umożliwiły obniżenie o rzędy wielkości szacowanej wartości postulowanej stałej oddziaływania między ciemną materią a znaną nam materią. Pokazano również wykorzystanie optycznego zegara atomowego jako wzorca częstotliwości dla obserwacji radioastronomicznych wykonywanych w sieci VLBI (ang. *very long base interferometry*)⁹¹.

3.3.5. Spektroskopia atomowa

W ramach pracy magisterskiej oraz na początku studiów doktoranckich zajmowałam się spektroskopią atomową, badając przejście interkombinacyjne $5^1S_0 - 5^3P_1$ w kadmie. Celem tych prac było badanie wpływu zderzeń na kształt linii widmowej oraz teoretycznych modeli kształtu linii. Pomiary były wykonywane metodą laserowo indukowanej fluorescencji (LIF). Próbka kadmu była umieszczona w kwarcowej komórce znajdującej się w piecu o temperaturze około 700 K. Zostało wyznaczone rozszczepienie nadsubtelne linii w izotopie ^{113}Cd

⁸⁸S. R. Kawa et al., *Tellus B: Chemical and Physical Meteorology* **62**, 759–769 (2010).

⁸⁹P. Weisło et al., *Nature Astronomy* **1**, 0009 (2017).

⁹⁰P. Weisło et al., *Science Advances* **4**, eaau4869 (2018).

⁹¹P. Krehlik et al., *Astronomy & Astrophysics* **603**, A48 (2017).

oraz przesunięcie izotopowe mierzone względem izotopu ^{114}Cd [3]. Pokazano, że rozszerzenia zderzeniowe poszczególnych komponentów nadsubtelnych w izotopie ^{113}Cd zaburzonym argonem są różne [2] oraz zaobserwowano występowanie asymetrii linii, która została przypisana efektom związanym ze skończonym czasem trwania zderzenia oraz mieszaniu linii [1].

3.4. Podsumowanie i perspektywy

Podsumowując, w dotychczasowej pracy dążyłam przede wszystkim do poprawienia precyzji i dokładności pomiarów kształtu, położenia i natężeń molekularnych linii widmowych, jak również do wypracowania skutecznych metod analizy danych uzyskanych w tych pomiarach. Na przestrzeni ostatnich lat można zauważyć wyraźny postęp: coraz częściej w literaturze dostępne są parametry kształtu linii uwzględniające subtelne efekty, takie jak zwężenie linii czy jej asymetria. Poprawia się również dokładność publikowanych danych, co wynika z rozwoju technik pomiarowych i obliczeniowych. Powyżej opisane prace stanowią wycinek tego globalnego trendu. Prowadzone przeze mnie prace badawcze w szczególności przyczyniły się do:

1. Powstania spektrometrów umożliwiających jedne z najdokładniejszych pomiarów w spektroskopii molekularnej.
2. Uzyskania zgodności między eksperymentalnymi i teoretycznymi natężeniami linii widmowych tlenu węgla na promilowym poziomie, a dwutlenku węgla na poziomie kilku promili, czyli o rząd wielkości lepszym niż do tej pory.
3. Nawiązania trwałej, owocnej współpracy między grupą teoretyczną i doświadczalną.
4. Poznania parametrów kształtu samozaburzonych linii widmowych tlenu z pasma B z porównywalną dokładnością jak dla pasma A, dzięki czemu są one prawie gotowe do użycia w najbardziej wymagających zastosowaniach atmosferycznych.
5. Powstania pierwszego w Polsce optycznego zegara atomowego, wykorzystywanego w licznych zastosowaniach z zakresu metrologii i badań podstawowych.
6. Powstania nowej techniki pomiarowej we wnęce optycznej, która umożliwi dokładne pomiary natężeń linii widmowych, a w warunkach nasycenia - jedne z najdokładniejszych pomiarów położenia linii widmowych.
7. Uzyskania najdokładniejszej doświadczalnej zależności prężności pary nasyconej lodu od temperatury.

Z drugiej jednak strony, coraz lepsze techniki pomiarowe i metody obliczeniowe pozwalają na stawianie pytań, na które jeszcze do niedawna nie można było uzyskać odpowiedzi. Umożliwiają również odpowiedź na przynajmniej niektóre spośród potrzeb wynikających z zastosowań pomiarów spektroskopowych, zarówno użytkowych, jak i związanych z badaniami podstawowymi. Możliwości stawiania kolejnych problemów wydają się nieograniczone. Wśród moich planów badawczych znajdują się między innymi:

1. Dalsze badania pasma B tlenu. Dotychczasowe prace prowadzone w Instytucie Fizyki UMK dotyczyły głównie parametrów samozaburzonych linii tlenu, natomiast w zastosowaniach atmosferycznych potrzebne są przede wszystkim parametry linii odpowiadające rozszerzeniu przez powietrze. Ponadto brakuje obecnie danych doświadczalnych dotyczących zależności parametrów kształtu linii z tego pasma od temperatury. Prace nad wyznaczeniem tych parametrów są w toku. Rozpoczęłam również badania efektów zderzeniowo indukowanej absorpcji (CIA, ang. *collisionally induced absorption*) w zakresie widmowym odpowiadającym pasmu B tlenu. CIA jest ważnym, ale słabo poznanym efektem w kontekście interpretacji widm atmosferycznych w przypadku zastosowań wymagających najwyższej dokładności.
2. Współpraca w ramach nowo powstałej Task Group on Advanced Spectroscopy przy Consultative Committee for Amount of Substance (działający przy International Bureau of Weights and Measures, BIPM) z zespołami zajmującymi się metrologią gazów oraz spektroskopią. Celem grupy jest rozwój metod spektroskopowych poprzez rygorystyczne pomiary porównawcze, oraz określenie standardów postępowania w pomiarach spektroskopowych, w których wyznaczana jest ilość substancji.

3. Dalsza współpraca z zespołami zajmującymi się obliczeniami teoretycznymi, w celu uzyskania dokładnych natężeń linii widmowych dla różnych pasm molekuł ważnych z punktu widzenia badań atmosferycznych i astrofizycznych. W szczególności trwają już dalsze prace dotyczące cząsteczki tlenku węgla, skoncentrowane na natężeniach linii bardzo słabych pasm absorpcyjnych, tzw. wysokich nadtonów.
4. Pomiarów parametrów kształtu linii widmowych w zakresie wysokich temperatur. Aktualnie uczestniczę w budowie spektrometru, który będzie przystosowany do pomiarów w temperaturach do około 300°C. Umożliwi on pomiary w znacznie szerszym niż do tej pory zakresie temperatur, potrzebnym do interpretacji widm rejestrowanych na potrzeby zastosowań astrofizycznych.
5. nierozwiązanym od wielu lat problemem jest dostępność dokładnych danych spektroskopowych dotyczących widma pary wodnej. Jest to cząsteczka o skomplikowanym widmie. Jest ona również trudnym obiektem doświadczalnym ze względu na silne efekty związane z jej adsorpcją na różnych powierzchniach. Natomiast ze względu na jej strukturę, linie absorpcyjne pary wodnej występują we wszystkich zakresach widmowych, wpływając na praktycznie wszystkie pomiary atmosferyczne. Planuję pomiary natężeń linii absorpcyjnych pary wodnej i współpracę z grupą teoretyczną z UCL w zakresie poprawy istniejącego modelu widma.
6. Planuję również pomiary widm mniej rozpowszechnionych izotopologów cząsteczek takich jak tlen czy tlenek węgla. Ich badania są trudne ze względu na problemy związane z określeniem ich zawartości w próbce. Stąd wynika brak wysokiej dokładności danych, które również są potrzebne w badaniach atmosferycznych.

4. Informacja o wykazywaniu się istotną aktywnością naukową albo artystyczną realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury, w szczególności zagranicznej

Moja dotychczasowa aktywność naukowa była zrealizowana w dwóch instytucjach: Uniwersytecie Mikołaja Kopernika w Toruniu (UMK), który jest miejscem mojego zatrudnienia, oraz w National Institute of Standards and Technology (NIST, Gaithersburg MD, USA). W NIST odbyłam dwa staże, których naukowe wyniki zostały pokrótce przedstawione poniżej. Moje pozostałe osiągnięcia naukowe są wynikiem prac prowadzonych na UMK.

4.1. National Institute of Standards and Technology, 09.2009 - 02.2010

W powyższym okresie, podczas studiów doktoranckich, odbyłam staż w NIST. Wykonałam wówczas pomiary zależności prężności pary nasyconej lodu od temperatury, które były podstawą mojej rozprawy doktorskiej oraz ostatnich dwóch publikacji z poniższego wykazu.

W wyniku mojego stażu w NIST w latach 2009-2010 powstały następujące publikacje:

1. D. A. Long, **K. Bielska**, D. Lisak, D. K. Havey, M. Okumura, C. E. Miller, J. T. Hodges, *The air-broadened, near-infrared CO₂ line shape in the spectrally isolated regime: Evidence of simultaneous Dicke narrowing and speed dependence*, J. Chem. Phys. **135**, 064308 (2011)
2. **K. Bielska**, D. K. Havey, G. E. Scace, D. Lisak, J. T. Hodges, *Spectroscopic measurement of the vapor pressure of ice*, Phil. Trans. R. Soc. A **370**, 2509-2519 (2012)
3. **K. Bielska**, D. K. Havey, G. E. Scace, D. Lisak, A. H. Harvey, J. T. Hodges, *High-accuracy measurements of the vapor pressure of ice referenced to the triple point*, Geophys. Res. Lett. **40**, 6303-6307 (2013)

4.2. National Institute of Standards and Technology, 02.2012 - 08.2014

Podczas mojej pracy w NIST została wykonana część doświadczalna pracy [H1], wchodzącej w skład osiągnięcia naukowego, o którym mówi art. 219 ust 1. pkt 2 Ustawy.

W wyniku prac prowadzonych przeze mnie w NIST podczas stażu podoktorskiego powstały następujące publikacje:

1. D. A. Long, L. Gameson, G.-W. Truong, **K. Bielska**, A. Cygan, J. T. Hodges, J. R. Whetstone, R. D. van Zee, *The effects of variations in buffer gas mixing ratios on commercial carbon dioxide cavity ring-down spectroscopy sensors*, J. Atmos. Ocean. Tech. **30**, 2604–2609 (2013)
2. J. Courtois, **K. Bielska**, J. T. Hodges, *Differential cavity ring-down spectroscopy*, J. Opt. Soc. Am. B: Opt. Phys. **30**, 1486-1495 (2013)
3. D. A. Long, A. J. Fleisher, K. O. Douglass, S. E. Maxwell, **K. Bielska**, J. T. Hodges, D. F. Plusquellic, *Multiheterodyne spectroscopy with optical frequency combs generated from a continuous-wave laser*, Opt. Lett. **39**, 2688-2690 (2014)
4. [H1] O. L. Polyansky, **K. Bielska**, M. Ghysels, L. Lodi, N. F. Zobov, J. T. Hodges, J. Tennyson, *High-accuracy CO₂ line intensities determined from theory and experiment*, Phys. Rev. Lett. **114**, 243001 (2015)

5. Informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę lub sztukę

5.1. Zajęcia dydaktyczne prowadzone na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UMK

5.1.1. Przed doktoratem

1. 2007 – 2008:
 - (a) Matematyka elementarna (ćwiczenia) 4 grupy
2. 2008 – 2009:
 - (a) Matematyka elementarna (ćwiczenia) 4 grupy
3. 2009 – 2010:
 - (a) Elementy fizyki (ćwiczenia) 1 grupa
 - (b) Elementy fizyki (laboratorium) 1 grupa
4. 2010 – 2011:
 - (a) Elementy fizyki (ćwiczenia) 1 grupa

5.1.2. Po doktoracie

1. 2011 – 2012
 - (a) Pracownia elektroniczna I (laboratorium) 2 grupy
2. 2014 – 2015
 - (a) Fizyka (laboratorium) 1 grupa
 - (b) Fizyka i technologia próżni (wykład) 1 grupa
 - (c) Fizyka ogólna 3 - fizyka falowa i optyka (ćwiczenia) 1 grupa
 - (d) Praca w zespołach badawczych (laboratorium) 1 grupa
 - (e) Fizyka ogólna III (optyka) (ćwiczenia) 1 grupa
 - (f) Matematyczne podstawy metrologii (ćwiczenia) 2 grupy
 - (g) Podstawy elektroniki (laboratorium) 1 grupa
 - (h) Pracownia obróbki danych pomiarowych (ćwiczenia) 1 grupa

3. 2015 – 2016

- (a) Fizyka i technologia próżni (wykład) 1 grupa
- (b) Fizyka ogólna 3 - fizyka falowa i optyka (ćwiczenia) 1 grupa
- (c) Praca w zespołach badawczych (laboratorium) 1 grupa
- (d) Pracownia fizyczna 1 cz.1 (laboratorium) 1 grupa
- (e) Matematyczne podstawy metrologii (ćwiczenia) 2 grupy
- (f) Metody opracowywania danych (wykład) 1 grupa
- (g) Metody opracowywania danych (ćwiczenia) 1 grupa
- (h) Pracownia obróbki danych pomiarowych (laboratorium) 1 grupa

4. 2016 – 2017

- (a) Analiza matematyczna 2 (ćwiczenia) 1 grupa
- (b) Fizyka i technologia próżni (wykład) 1 grupa
- (c) Fizyka ogólna 3 - fizyka falowa i optyka (ćwiczenia) 1 grupa
- (d) Pracownia fizyczna 1 cz.1 (laboratorium) 1 grupa
- (e) Pracownia fizyczna 1 cz.1 (ćwiczenia) 1 grupa
- (f) Matematyczne podstawy metrologii (ćwiczenia) 2 grupy
- (g) Podstawy elektroniki (laboratorium) 1 grupa

5. 2017 – 2018

- (a) Podstawy elektroniki (laboratorium) 1 grupa
- (b) Podstawy metrologii (ćwiczenia) 2 grupy
- (c) Pracownia zespołowa (laboratorium) 1 grupa

6. 2018 – 2019

- (a) Fizyka ogólna 3 - fizyka falowa i optyka (ćwiczenia) 1 grupa
- (b) Pracownia fizyczna 1 cz.1 (laboratorium) 1 grupa
- (c) Analiza matematyczna 1 (ćwiczenia) 1 grupa
- (d) Podstawy elektroniki (laboratorium) 2 grupy
- (e) Podstawy metrologii (ćwiczenia) 2 grupy

7. 2019 – 2020

- (a) Fizyka ogólna 3 - fizyka falowa i optyka (ćwiczenia) 1 grupa
- (b) Analiza matematyczna 1 (ćwiczenia) 1 grupa
- (c) Podstawy metrologii (ćwiczenia) 1 grupa

8. 2020 – 2021

- (a) Fizyka ogólna 3 - fizyka falowa i optyka (ćwiczenia) 1 grupa
- (b) Analiza matematyczna 1 (ćwiczenia) 1 grupa
- (c) Podstawy metrologii (ćwiczenia) 1 grupa

9. 2021 – 2022

- (a) Fizyka ogólna 3 - fizyka falowa i optyka (ćwiczenia) 1 grupa
- (b) Analiza matematyczna 1 (ćwiczenia) 1 grupa
- (c) Podstawy metrologii (ćwiczenia) 1 grupa

5.2. Opieka nad pracami dyplomowymi

1. praca inżynierska: Paulina Lubińska, „Budowa i zastosowanie interferometru Fabry-Pérot”, fizyka techniczna, 2017
2. praca licencjacka: Anna Macko, „Oprogramowanie do analizy i prezentacji wyników pomiarów kształtu linii widmowych”, fizyka, 2017

5.3. Opieka nad doktorantami

2019-obecnie: promotor pomocniczy mgr Aleksandra Balashova
projekt doktorski „Highly accurate line intensity studies of weak molecular transitions for atmospheric application”

5.4. Opieka nad studentami w ramach programu „The Toruń Astrophysics/Physics Summer program - TAPS”

Grzegorz Łukasiewicz, Uniwersytet Jagielloński, 4 tygodnie. Student zbudował prosty spektrometr typu CRDS i przetestował jego działanie.

5.5. Referaty wygłoszone podczas Seminarium Instytutu Fizyki UMK

10.06.2021 „Molecular spectroscopy: towards accurate reference parameters for atmospheric applications”

5.6. Referaty wygłoszone podczas seminarium Zakładu/Katedry Fizyki Atomowej, Molekularnej i Optycznej

11.04.2008, „W poszukiwaniu struktury izotopowej linii widmowej 326.1 nm kadmu”

8.05.2009, „O białych komórkach i teorii Knota”

5.03.2010, „Pomiar prężności par nasyconych lodu z wykorzystaniem spektroskopii typu FS-CRDS”

11.03.2011, „Co wiemy o prężności par nasyconych lodu?”

6.05.2011, „Spektroskopowe badania prężności pary nasyconej lodu”

12.06.2015, „Differential cavity ring-down spectroscopy (D-CRDS)”

3.02.2017, „Pomiary natężeń linii widmowych dwutlenku węgla”

16.04.2021, „Near-infrared saturation spectroscopy of CO in an optical cavity”

5.7. Rada Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej oraz Rada Dyscypliny Nauk Fizyczne

Od roku 2017 byłem przedstawicielem nauczycieli akademickich nieposiadających tytułu profesora ani stopnia naukowego doktora habilitowanego w Radzie Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UMK. Obecnie, od czasu zmiany struktury Uniwersytetu, należę do Rady Dyscypliny Nauk Fizyczne.

5.8. Dni otwarte - akcja „Dziewczyny do Ścisłych!”

W roku akademickim 2015/2016 oraz 2016/2017 byłem pełnomocnikiem Dziekana WFAiS ds. akcji „Dziewczyny do Ścisłych!”. Jej celem jest promocja kierunków studiów z zakresu nauk ścisłych i technicznych wśród uczennic szkół ponadpodstawowych. W ramach akcji, organizowanej przez Fundację Edukacyjną „Perspektywy” pod patronem Konferencji Rektorów Polskich Uczelni Technicznych, organizowałam „dzień otwarty” na WFAiS.

5.9. Inne prace organizacyjne

Przygotowanie wystawy „70 lat fizyki na UMK” (2016).

5.10. Pozostała działalność popularyzująca naukę

1. Wystawa „Fiat Lux – od Witelona do tomografu optycznego” w Ratuszu Staromiejskim w Toruniu – udział w zespole organizującym, 2008
2. Wykład dla nauczycieli pt. „Fizyczne właściwości wody. Przemiany fazowe, para nasycona lodu”, I Liceum Ogólnokształcące w Toruniu, 23.11.2011
3. Organizacja warsztatów dla uczniów szkół ponadgimnazjalnych pt. „Nowoczesna Fizyka Atomowa, Molekularna i Optyczna dla Młodzieży II”, Toruń, 28-29.09.2015

6. Pozostałe informacje dotyczące przebiegu kariery zawodowej

6.1. Nagrody i wyróżnienia

1. Zespołowa nagroda Rektora Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu (II stopnia) za osiągnięcia uzyskane w dziedzinie naukowo-badawczej w 2012 roku
2. Wyróżnienie „MML Accolade: MML Distinguished Associate *for the development and application of advanced laser spectroscopy methods, enabling sensitive and accurate measurements of greenhouse gases*”, National Institute of Standards and Technology, Materials Measurement Laboratory, 2016