



UNIwersytet
Warszawski

Wydział Chemii



Prof. dr hab. Robert Moszyński
Pracownia Chemii Kwantowej

e-mail: rmoszyns@tiger.chem.uw.edu.pl
tel: (48) 22 55-26-389
<http://tiger.chem.uw.edu.pl>

Warszawa, 12 maja 2022

Recenzja osiągnięcia naukowego dr. inż. Mariusza Pawlaka oraz całokształtu dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego w związku z Jego ubieganiem się o stopień naukowy doktora habilitowanego

Sylwetka Kandydata

Od początku swojej kariery naukowej dr inż. Mariusz Pawlak jest związany z Uniwersytetem Mikołaja Kopernika w Toruniu. Ukończył studia inżyniersko-magisterskie na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki stosowanej. Pracę inżynierską pt. „Komputerowe modelowanie ruchu. Skoki ze spadochronem” wykonał pod kierunkiem prof. dr. hab. Jana Wasilewskiego uzyskując tytuł zawodowy inżyniera fizyki technicznej. Studia magisterskie były prawdopodobnie nakierowane już na fizykę teoretyczną, bo pracę magisterską pt. „Efekt Starka w atomie wodoru” wykonał pod kierunkiem prof. dr. hab. Mirosława Bylickiego, eksperta w dziedzinie teoretycznej fizyki atomowej, a w szczególności teorii stanów rezonansowych. Mimo to, uzyskał tytuł zawodowy magistra fizyki technicznej. I oto ten fizyk „techniczny” wykonał pracę doktorską również pod kierunkiem prof. Bylickiego pt. „Stany związane i rezonansowe układy kwantowe w polu elektromagnetycznym oraz w otoczeniu plazmy”. W trakcie pracy nad doktoratem został zatrudniony jako pracownik inżynierijno-techniczny odpowiedzialny za administrację infrastrukturą serwerowo-sieciową w oparciu o systemy linuksowe w Zakładzie Chemii Kwantowej UMK. W latach 2010-2018 pracował na etacie asystenta naukowo-dydaktycznego w tymże Zakładzie, a od 2018 roku został awansowany na etat adiunkta naukowo-dydaktycznego.

Dr inż. Mariusz Pawlak odbył długoterminowy staż podoktorski w Technion-Israel Institute of Technology w Haifie w Izraelu w zespole prof. Nimroda Moiseyeva i kilka krótkoterminowych, w bardzo prestiżowych instytucjach naukowych, takich jak Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics w Cambridge, USA, Uniwersytet w Heidelbergu (Niemcy), Weizmann Institute of Science, Rehovot, Izrael, Indian Association for the Cultivation of Science, Indie. Dzięki licznym stażom zagranicznym miał możliwość nawiązania szerokiej międzynarodowej współpracy naukowej, czego rezultatem jest szereg prac zrealizowanych w zespołach międzynarodowych. Badania prowadzone w laboratoriach zagranicznych, w zespołach angażujących zarówno teoretyków jak i eksperymentatorów, zaowocowały wartościowymi wynikami, które będą szczegółowo omówione w dalszej części tej recenzji.

Zanim przejdę do bardziej szczegółowej oceny osiągnięcia habilitacyjnego i dorobku, skupię się teraz na ocenie scjentometrycznej i informacjach zamieszczonych w materiałach Habilitanta. Dr inż. Mariusz Pawlak jest współautorem 20. publikacji naukowych, z czego wszystkie zostały ogłoszone w

czasopismach z listy filadelfijskiej. Warto odnotować, że wszystkie prace ukazały się w bardzo zacnych czasopismach z chemii teoretycznej i obliczeniowej oraz fizyki chemicznej i chemii fizycznej, takich *Nature Phys.*, *J. Chem. Theor. Comp.*, czy *J. Chem. Phys.* Z 20. prac, aż 15 zostało opublikowane po uzyskaniu stopnia naukowego doktora. Daje to średnio 1.5 prac rocznie po doktoracie, co jest wynikiem średnim, choć akceptowalnym biorąc pod uwagę zaangażowanie Habilitanta w działalność dydaktyczną, popularyzatorską i organizacyjną na rzecz Wydziału, o czym napiszę niżej. Sumaryczny współczynnik wpływu (IF) publikacji wynosi 87, co daje średni IF na publikację prawie 4.5. Jest to bardzo dobry wynik, jak na publikacje z dziedziny chemii teoretycznej, obliczeniowej i modelowania molekularnego. Oddźwięk prac doktora Pawlaka w literaturze światowej jest również dobry. Jego prace były cytowane 174 razy bez autocytoowań, co daje akceptowalny wynik prawie dziesięciu cytowań na pracę. Indeks Hirsha 10 jest również akceptowalny dla kandydata do stopnia naukowego doktora habilitowanego nauk chemicznych pracującego czynnie w chemii teoretycznej i obliczeniowej od 18. lat (włączając w to okres studiów doktoranckich). Nie przewyższa jednak średniej krajowej wniosków o stopień doktora habilitowanego w tej konkretnej dziedzinie, szczególnie, że staż pracy po doktoracie (10 lat) nie jest przesadnie krótki.

Habilitant był/jest promotorem pomocniczym prac doktorskich Pana Marcina Stachowiaka i Pani Martynty Patery. W materiałach nie znalazłem żadnej informacji o promotorach, tematyce doktoratów i planowanych lub już odbytych obron tych prac doktorskich.

Trudniej jest ocenić aktywność konferencyjną Habilitanta. Wyniki swoich badań naukowych dr Mariusz Pawlak przedstawiał prawdopodobnie na 25.(?) konferencjach naukowych i z przedstawionych materiałów wynika, że na zaproszenie miał ściśle dwa wykłady. Muszę dodać, że choć liczba 25 wygląda imponująco, jak na staż pracy Habilitanta, to niektóre z tych konferencji nie były wysokiego kalibru. Kandydat przedstawiał również wyniki swoich badań na wielu seminariach w zaprzyjaźnionych ośrodkach w Polsce i na świecie, na zaproszenie.

Dr inż. Mariusz Pawlak jest często zapraszany do recenzowania prac dla prestiżowych czasopism naukowych. Jedno jest tak prestiżowe, że aż je wymienię, *Nature Comm.* Świadczy to o ugruntowanej pozycji Habilitanta w nauce światowej.

Habilitant jest bardzo cenionym i docenianym pracownikiem Wydziału Chemii Uniwersytetu Mikołaja Kopernika. Jest laureatem kilku nagród i wyróżnień, m.in. za osiągnięcia uzyskane w dziedzinie naukowo-badawczej (zespołowe wyróżnienie Rektora UMK), za publikacje w wysoko punktowanych czasopismach naukowych (nagroda Dziekana Wydziału Chemii UMK), za pozyskiwanie środków w ramach grantów zewnętrznych (nagroda Dziekana Wydziału Chemii UMK). Jest również laureatem programu *TransFormation.doc* realizowanego przez MNiSW.

Z radością wyczytałem w materiałach, że dr inż. Mariusz Pawlak kierował wieloma projektami badawczymi. Z takich poważniejszych warto wymienić projekt *Mobilność Plus* finansowany przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego realizowany w latach 2013-2014, grant finansowany przez Narodowe Centrum Nauki *Miniatura* oraz grant *Sonata* przyznany przez Narodowe Centrum Nauki, realizowany w latach 2017-2020. Bardzo cieszy taka aktywność w zdobywaniu środków zewnętrznych na badania naukowe, szczególnie, że dr Pawlak uzyskał pierwszy grant tuż po obronie pracy doktorskiej i z sukcesem uzyskuje kolejne środki na badania, nawet w trudnych konkursach, takich jak *Sonata*.

Z powyższego syntetycznego podsumowania wysuwa się sylwetka poważnego uczonego o ugruntowanej pozycji naukowej, doskonałym dorobku naukowym, docenianym w kraju i zagranicą. Może jedynym słabym punktem opisanego dorobku naukowego jest brak referatu na zaproszenie na poważnej konferencji międzynarodowej i artykułu przeglądowego w poważnym czasopiśmie naukowym, ale mam nadzieję, że zostanie to nadrobione w najbliższym czasie.

Ocena osiągnięcia habilitacyjnego i dorobku naukowego Kandydata

Zanim przejdę do oceny merytorycznej osiągnięcia habilitacyjnego dr. inż. Mariusza Pawlaka, zajmę się stroną formalną. Na owo osiągnięcie składa się dziewięć publikacji naukowych [H1-H9], które ukazały się w bardzo dobrych czasopismach o zasięgu międzynarodowym. W siedmiu z tych prac dr Pawlak jest autorem-korespondentem, co świadczy o jego wiodącej roli w tych pracach. Oświadczenia współautorów o ich wkładzie pracy w powstanie publikacji również dowodzą wiodącej roli Habilitanta. Współautorzy są zresztą bardzo skromni. Większość ocenia swój wkład marginalnie. Tylko w pracy [H2] współautorzy ocenili swój wkład pracy bardziej hojnie, ale w tej szczególnej pracy rola Habilitanta była mniej dominująca, bo część eksperymentalna jest istotną składową tej pracy. Warto podkreślić, że ta praca nie ukazałaby się w *Nature Phys.* bez istotnego wkładu teoretycznego i vice versa. Cieszy, że oświadczenia współautorów są bardzo spójne z dość skromną samooceną wkładu Habilitanta.

W swoich badaniach podoktorskich dr inż. Mariusz Pawlak zajął się teoretycznym opisem procesów jonizacji Penninga. Procesy te zachodzą w kompleksach zderzeniowych, w których jeden z podukładów jest w stanie wzbudzonym o energii wzbudzenia przewyższającej energię jonizacji drugiego podukładu. W wyniku zderzenia jeden z podukładów ulega deekscytacji do stanu podstawowego, a drugi jonizacji. Habilitant zajął kompleksem zderzeniowym He^*H_2 . Opis takich zderzeń, już w przybliżeniu Borna-Oppenheimera, jest wysoce nietrywialny. Stan elektronowy układu początkowego leży w kontinuum elektronowym stanu zjonizowanego i jest rezonansem Feshbacha. Jak wiadomo, rezonanse Feshbacha charakteryzują się zespoloną energią, której część urojona zwana szerokością związana jest z czasem życia rezonansu. Oznacza to, że elektronowe rezonanse Feshbacha w przybliżeniu Borna-Oppenheimera charakteryzują się zespoloną powierzchnią energii potencjalnej, której szerokość jest niezerowa i zależy od współrzędnych kompleksu. Przekrój czynny na jonizację Penninga otrzymuje przez rozwiązanie równań dla ruchu jąder w zespolonym potencjale. Jak widać z tego związłego opisu zagadnienie jest mocno nietrywialne i tylko cieszy, że problem został kompleksowo podjęty.

Przejdę teraz do omówienia prac [H1-H9]. Przekornie zacznę od pracy [H4], w której Autorzy stosują z sukcesem metody *ab initio* do obliczeń zespolonej powierzchni oddziaływania dla kompleksu He^*H_2 . W obliczeniach części rzeczywistej zastosowano standardowe metody chemii kwantowej typu EOM-CC dla stanów o wysokim spinie i metodę stabilizacji do uzyskania względnie stabilnego położenia rezonansu w funkcji geometrii cząsteczki (odległość H-H w cząsteczce wodoru była zamrożona). Trochę zasmuciło mnie, że Habilitant nie zacytował w tym kontekście pracy Gołębińskiego i Taylora z lat 1960., którzy jako pierwsi sformułowali metodę stabilizacji. Nawiasem mówiąc, jest to chyba najbardziej cytowana prof. Alojzego Gołębińskiego. Uzyskane grafy stabilizacyjne, czyli położenia rezonansu w funkcji rzeczywistego parametru stabilizacyjnego η zostały przedstawione w postaci aproksymantów Padé, a następnie dokonano przedłużenia analitycznego do płaszczyzny zespolonej przez skalowanie zespolone $\eta \rightarrow ae^{i\theta}$. Ostateczne położenia rezonansów, jak i ich szerokości otrzymuje się jako punkty

stacjonarne energii w parametrach α i θ . Jak widać, Autorzy tej pracy, mówiąc kolokwialnie, odwalili kawał dobrej roboty bez pewności nawet połowicznego sukcesu. W końcu metoda stabilizacji i skalowania zespolonego stosuje się do bardzo wąskich rezonansów i wymaga wykonania obliczeń tysięcy punktów. Sukces tych obliczeń *ab initio* szczególnie raduje, bo wygenerowane z tego potencjału stałe szybkości reakcji jonizacji Penninga są w bardzo dobrej zgodności z pomiarami wykonanymi w zespole Eda Nareviciusa w Instytucie Weizmanna, ale o tym zaraz niżej. W tym miejscu wspomnę jeszcze tylko, że krytyka metody zespolonego potencjału absorbującego na pierwszej stronie tej pracy jest nieuzasadniona. Mój zespół w wielu badaniach stosował tą metodę z sukcesem. Została ona totalnie „zjechana” przez moich kolegów fizyków z Krakowa i Barcelony w pracach dotyczących generacji wyższych harmonik w silnym polu laserowym, ale po przeczytaniu matematycznie dość trudnej pracy Manolopoulosa opublikowanej w JCP, diametralnie zmienili zdanie. Polecam, milej lektury!

Mam drobny problem z pracami [H2] i [H7]. Praca [H2] ukazała się w prestiżowym *Nature Phys.* na krótko przed pracą [H4], a jednak zastosowano w niej w moim pojęciu *ad hoc* potencjał, którego część rzeczywista była uzyskiwana metodami CCSD(T)[baza duża]+poprawka FCI na wzbudzenia poczwórne[baza mniejsza]. Szerokość rezonansu nie została *explicite* uwzględniona, natomiast nałożone zostały reaktywne (absorbujące) warunki brzegowe, które prowadziły do przekrojów czynnych na jonizację Penninga. Zgodność teorii z eksperymentem była taka sobie, więc Autorzy zdecydowali się leciutko przeskalować energię full CI potencjału rzeczywistego i bingo(!), uzyskali pełną zgodność teorii z eksperymentem. Mój niedosyt polega na tym, że mając prawie pod ręką pełny potencjał zespolony *ab initio*, Autorzy zdecydowali się na „cerowany” potencjał rzeczywisty, bo ten model ilościowo wyjaśnia duże różnice w przekrojach czynnych na zderzenia He^* z *para*- H_2 i *ortho*- H_2 . Osobiście pracowałem dość długo w teoretycznej spektroskopii molekuł Van der Waalsa i jakoś fakt, że dla słabo oddziałujących układów zachowanie w zderzeniach cząsteczki *para*, która jest głównie w stanie rotacyjnym $j=0$, czyli jest sferycznie symetryczna i wygląda jak zderzenie dwóch atomów (składowa reaktywna mała), a dla cząsteczki *ortho*, która jest głównie w stanie rotacyjnym $j=1$ anizotropia oddziaływania zaczyna odgrywać istotną rolę. Tego typu efekty zaobserwowano już w latach 1970. w pracach eksperymentalnych Boba MacKellara i współpracowników oraz teoretycznych Boba LeRoya i współpracowników.

Teraz pewna niekonsekwencja między pracami [H2], [H7] i [H4]. Otóż w pracy [H4], opublikowanej pośrodku lat między publikacjami [H2] i [H7], wyprodukowano model w pełni *ab initio* dwuwymiarowej zespolonej powierzchni energii oddziaływania, która, według Autorów, bardzo dobrze odtwarza wyniki eksperymentalne z pracy [H2]. W pracy [H2] przedstawiono model oddziaływania sztywnych cząsteczek z atomami, ale z pewnym dofitowaniem wyników full CI do wyników eksperymentalnych. Z kolei w pracy [H7] dowiedziono, że jeśli uwzględni się niesztywność cząsteczki H_2 , to wszelkie poprawki związane ze skalowaniem energii full CI są zbędne. Po prostu wyniki teoretyczne dla przekrojów czynnych na jonizację Penninga znowu świetnie zgadzają się z eksperymentem. Muszę podkreślić, że obliczenia dla ruchu jąder w pracy [H7] zostały wykonane znacznie prostszymi metodami niż w pracy [H2]. Metody te omówię poniżej, natomiast istotnie mi brakuje części spinającej te trzy wymienione wyżej prace, bo wynika z nich, że każdy model może wyjaśnić proces jonizacji Penninga w niskich temperaturach, a te trzy modele [H4], [H2] i [H7] chyba jakoś wykluczają się nawzajem? Myślę, że najwyższy czas, aby wyprodukować ostateczny model oddziaływania *ab initio*.

Czas na omówienie prac [H1] i [H3]. Mogłyby być połączone razem, bo praca [H3] różni się od pracy [H1] uwzględnieniem rotacji cząsteczki H_2 w kompleksie. Ideą obu prac jest konstrukcja macierzy Hamiltonianu w bazie kątowej. Taka macierz nie będzie diagonalna, bo elementy macierzowe potencjałów nie są diagonalne. Nic nie stoi na przeszkodzie, żeby je zdiagonalizować. Wtedy jednak operator energii kinetycznej staje się niediagonalny. Gdy zaniedba się człony niediagonalne, to uzyskuje się jednowymiarowy diagonalny Hamiltonian w ramach wariacyjnej teorii adiabaticznej. Podejście zaproponowane w pracach [H1] i [H3] jest zgrabne i wywodzi się zapewne z rozwiązywania równań silnego sprzężenia dla zderzeń reaktywnych we współrzędnych hipersferycznych. Pewną zaletą wariacyjnej teorii adiabaticznej jest możliwość wyprowadzenia bardzo zgrabnego wyrażenia na stałą szybkości reakcji jonizacji Penninga w niskich temperaturach. Wyrażenie to wyprowadzono w pracy [H5]. Obliczone wartości z potencjałem z pracy [H4] dobrze zgodziły się z danymi eksperymentalnymi z pracy [H2].

W pracy [H6] zbadano jonizację Penninga przy zderzeniach atomów helu w stanie zdegenerowanym P z cząsteczką wodoru i z cząsteczką HD. Zespolone powierzchnie oddziaływania zostały obliczone metodami rozwiniętymi w pracy [H4]. Sama dynamika ruchu jąder została opisana metodą z pracy [H3], a stałą szybkości reakcji jonizacji Penninga w niskich temperaturach obliczono metodą rozwiniętą w pracy [H5]. Praca [H6] wyjaśniła strukturę rezonansową pojawiającą się krzywych zależności przekroju czynnego na jonizację Penninga dla zderzeń z H_2 i HD oraz wyjaśniła gruntowne załamanie klasycznej teorii Langevin w niskich temperaturach.

Uważam, że prace [H1-H8] wyczerpująco spinają tematykę jonizacji Penninga od strony teorii. Praca [H9], w której wyprowadzono wzory na kątove elementy macierzowe w laboratoryjnym układzie współrzędnych dla układu atom-zamkniętopowłokowa cząsteczka dwuatomowa są znane od lat 1970. z prac Boba LeRoya, a podajże w latach 1980. wyprowadzono wzory dla oddziaływania dwóch molekuł o dowolnej symetrii. Dlatego umieszczenie tej pracy w cyklu habilitacyjnym uważam za niefortunne.

Podsumowując część merytoryczną tej recenzji przyznaję, że z ciekawością i z dobrym zrozumieniem tą pracę przeczytałem. Z radością też stwierdzam, że nie mam żadnych istotnych uwag czy zastrzeżeń merytorycznych. Drobne moje wątpliwości zawarłem w tekście. Jedyne co zauważyłem i o co mam lekki żal do Autora, że nie zacytował żadnej pracy Felicji Mrugały, profesora Jego macierzystej uczelni, która była pionierem w dziedzinie propagacji równań silnego sprzężenia opartej na pochodnej logarytmicznej funkcji falowej...

Ocena dorobku dydaktycznego, popularyzatorskiego i organizacyjnego

Dr inż. Mariusz Pawlak ma bogaty dorobek dydaktyczny, popularyzatorski i organizacyjny, i skupię się w tej recenzji na najważniejszych według mnie wątkach.

Dr inż. Mariusz Pawlak prowadził szereg zajęć laboratoryjnych oraz ćwiczeń z podstaw chemii kwantowej, chemii teoretycznej, chemii informatycznej, matematyki i matematyki z elementami statystyki, programowania i metod numerycznych, a nawet(!) z podstaw chemii analitycznej. Był promotorem czterech prac licencjackich na Wydziale Chemii. Co ważniejsze, brał czynny udział w opracowywaniu programu studiów dla nowej specjalności „chemia informatyczna”.

Jak już wspomniałem wyżej Habilitant był/jest promotorem pomocniczym prac doktorskich Pana Marcina Stachowiaka i Pani Martynty Patery. Niestety w materiałach nie znalazłem żadnej informacji o promotorach, tematyce doktoratów i planowanych lub już odbytych obron tych prac doktorskich.

Dr inż. Mariusz Pawlak zajmuje się także działalnością popularyzatorską. Dobrym przykładem są zajęcia w ramach szkoły dla doktorantów z kraju i z zagranicy Toruń Astrophysics, Spectroscopy and Quantum Chemistry School czy też warsztaty fizyczne dla uczniów szkół ponadpodstawowych w ramach Toruńskiego Festiwalu Nauki i Sztuki.

W ramach działalności organizacyjnej na rzecz Wydziału i Uniwersytetu dr inż. Mariusz Pawlak współorganizował seminaria i warsztaty naukowe gości UMK zaproszonych z zagranicy. Uczestniczył też w organizacji szeregu konferencji naukowych, że wymienię tylko dwie według mnie najbardziej prestiżowe: *Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology* (2022) oraz *Central European Symposium on Theoretical Chemistry* (2011). W ramach obowiązków organizacyjnych, dr Mariusz Pawlak był członkiem Rady Młodych Wydziału Chemii UMK (zgaduję, że delegatem pracowników niesamodzielnych do Rady Wydziału Chemii UMK).

Habilitant udziela się również w szerszych działaniach organizacyjnych poza macierzystą uczelnią, m.in. był członkiem Rady Młodych Naukowców 5. kadencji w Ministerstwie Nauki i Szkolnictwa Wyższego, jest członkiem priorytetowego zespołu badawczego, który został wyłoniony w konkursie w ramach programu MNiSW „Strategia doskonałości – uczelnia badawcza”.

Konkludując tę część recenzji uważam, że działalność dydaktyczna, popularyzatorska i organizacyjna dra inż. Mariusza Pawlaka może być uznana za godną wyróżnienia.

Podsumowanie

Podsumowując tą recenzję, wyrażam moją bardzo pozytywną opinię o wniosku dra inż. Mariusza Pawlaka o nadanie mu stopnia naukowego doktora habilitowanego. Jego osiągnięcia habilitacyjne, jak i całokształt jego działalności naukowej oraz recepcja jego prac na świecie świadczą o tym, że jest dojrzałym uczonym o ugruntowanej pozycji naukowej. W moim odczuciu Habilitant spełnia z nadmiarem ustawowe wymagania stawiane wnioskowi o stopień naukowy doktora habilitowanego. Chcę podkreślić, że jest to jedno z najlepszych osiągnięć habilitacyjnych, jakie przyszło mi opiniować w ostatnim okresie. W związku z tym bardzo gorąco popieram wniosek o nadanie dr. inż. Mariuszowi Pawlakowi stopnia naukowego doktora habilitowanego.



Robert Moszyński