

Lublin, dnia 30.08.2018

Prof. dr hab. Krzysztof Woliński
Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej
Wydział Chemii
Zakład Chemii Teoretycznej
pl. M. C. Skłodowskiej 3
20-031 Lublin

POLITECHNIKA GDAŃSKA WYDZIAŁ FIZYKI TECHNICZNEJ I MATEMATYKI STOSOWANEJ
Wpłynęło dnia 05.09.2018
L. dz. 50/WFTiMS/SN/2018
Zał.

Ocena dorobku naukowego i dydaktycznego Pana dr Jana Franza w związku z postępowaniem habilitacyjnym

1. Uwagi ogólne

Pan dr Jan Franz jest absolwentem Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität w Bonn gdzie w 1999 roku uzyskał tytuł magistra chemii. Cztery lata później zostaje doktorem nauk przyrodniczych na podstawie rozprawy pt. "Efektywne operatory Hamiltona do przybliżonego obliczania korelacji elektronowej w molekułach – teoria, implementacja i zastosowanie." Promotorem zarówno pracy magisterskiej jak i pracy doktorskiej była profesor Sigrid D. Peyerimhoff, wybitna postać w chemii kwantowej.

W 1999 roku dr Franz rozpoczyna pracę zawodową w charakterze asystenta w Institute for Physical and Theoretical Chemistry na uniwersytecie w Bonn gdzie pracuje do roku 2004. Potem do czerwca roku 2005 jest asystentem w Department of Chemistry uniwersytetu w Rzymie. Przez kolejne cztery lata do 2009 roku jest pracownikiem naukowym w Department of Physics and Astronomy na University College London. W latach 2009-2011 jest zatrudniony jako asystent w Department of Chemistry na uniwersytecie w Gothenburg w Szwecji. W roku 2011 wraca na uniwersytet w Bonn gdzie pracuje do 2013 roku. Od października 2013 roku do chwili obecnej zatrudniony jest na stanowisku adiunkta na Wydziale Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechniki Gdańskiej. Zaiste bardzo długa i bogata droga zawodowa.



Tematyka badawcza dr Franza w początkowym okresie Jego kariery naukowej dotyczyła w ogólności wzbudzonych stanów elektronowych i zagadnień spektroskopii elektronowej. Badania wzbudzonych stanów elektronowych w małych, liniowych klasterach węgla były tematem Jego pracy magisterskiej. Kwantowochemiczny opis widm elektronowych w hydroksychinoline i wysokosymetrycznych, cyklicznych klasterach C₆ był tematem dwóch kolejnych publikacji w latach 2001 i 2005. Habilitant zajmował się również badaniem oddziaływań (sprzężeń) wibronowych co było tematem trzech prac opublikowanych w latach 2006-2007. Wszystkie te prace miały charakter aplikacyjny ale z całą pewnością nie były standardowe. Wymagały one bowiem wykonania bardzo zaawansowanych, nierutynowych obliczeń kwantowochemicznych.

Dr Franz ma również wkład w rozwój metod chemii kwantowej. Jego doktorat oraz praca z 2006 roku dotyczyły uwzględnienia efektów korelacji elektronowej w obliczeniach kwantowochemicznych. W badaniach tam przedstawionych rozszerzono wieloreferencyjny rachunek zaburzeń Möllera-Plasseta. Różne warianty tej metody były popularne już w latach 90-tych (Multi-Reference MP2 = MRMP2, Complete Active Space MP2 = CASMP2 i inne). Rozwinięcie dokonane przez dr Franza polegało na wprowadzeniu nowego, efektywnego Hamiltonianu uwzględniającego silne oddziaływania jednocześnie kilku stanów elektronowych. Takie wersje metody MRMP2 znane są jako Multi-State-Multi-Reference MP2 = MSMRMP2. Metody MSMRMP2 pozwalają na opis układów otwartopowłokowych i elektronowych stanów wzbudzonych. Metoda MSMRMP2 zastosowana była przez Habilitanta również do badania fotoindukowanych reakcji transferu protonu oraz reakcji fotodysocjacji wody utlenionej.

Ogólnie można stwierdzić, że ten pierwszy okres aktywności naukowej Habilitanta dotyczył kwantowochemicznego opisu struktury elektronowej molekuł.

Mniej więcej od 2006 roku zainteresowania naukowe dr Franza uległy przesunięciu w kierunku fizyki i koncentrują się obecnie na teoretycznym opisie procesu zderzeń pozytonów z atomami i molekułami. To jest właśnie tematyka cyklu trzynastu prac składających się na osiągnięcie naukowe zwane tu dalej rozprawą habilitacyjną.

Muszę stwierdzić, że ta tematyka badawcza jest dla mnie nowa. Z dużym więc zainteresowaniem przeczytałem zarówno samą rozprawę habilitacyjną i wszystkie trzynaście prac wchodzących w jej skład jak też kilka prac źródłowych.

2. Ocena rozprawy habilitacyjnej

Rozprawa habilitacyjna Pana dr Franza nosi tytuł "Teoretyczne metody opisu zderzeń pozytonów z cząsteczkami". Zgodnie z tytułem przedstawia ona wyniki badań własnych Autora dotyczących teoretycznego opisu procesów zderzeń pozytonów z cząsteczkami w fazie gazowej. Badania takie na poziomie molekularnym pozwalają wyjaśnić i zrozumieć charakter oraz mechanizm rozpraszania pozytonów w kontakcie z materią.

Głównym parametrem obliczanym w badaniach Habilitanta jest przekrój czynny na różnego rodzaju zderzenia pozytonów z atomami lub molekułami. Wyznaczanie przekrojów czynnych na drodze teoretycznej jest bardzo skomplikowane. Obliczenia wymagają bowiem rozwiązania równań opisujących proces rozpraszania dla układów wielociałowych (jądra, elektrony i jeden pozyton) z silną korelacją międzycząstkową.

Badania dotyczące pozytonów są bardzo ważne z uwagi na ich coraz szersze zastosowania. I tak pozytony i zjawiska z nimi związane wykorzystuje się obecnie w astrofizyce i badaniach materiałowych. Są one również używane w medycynie, gdzie tzw. emisyjna tomografia pozytonowa (*Positron-emission tomography*=*PET*) jest coraz częściej stosowana do badań mózgu, badań serca, detekcji komórek nowotworowych i różnego rodzaju nietypowych stanów zapalnych. Technika PET oparta jest na rejestracji dwóch kwantów promieniowania powstających w wyniku anihilacji pary pozyton-elektron.

Rozprawa habilitacyjna Autora (autoreferat) podzielona została na pięć części. We wstępie przedstawiono najważniejsze procesy zachodzące podczas rozpraszania pozytonów na cząsteczkach oraz wymieniono teoretyczne metody wykorzystane przez Autora do opisu procesu rozpraszania. W części drugiej przedstawiono rozwinięcie własne jednej z tych metod, wieloskładnikowej metody DFT oraz rezultaty obliczeń uzyskane z jej użyciem. W kolejnym, trzecim rozdziale przedstawiono uogólnienie drugiej ze stosowanych metod

obliczeniowych tzw. metody molekularnej R-macierzy. W rozdziale czwartym omówiono progres w dziedzinie teoretycznej analizy zderzeń pozytonów z biocząsteczkami. Ostatni rozdział zawiera krótkie podsumowanie.

Dla mnie najbardziej istotne wydają się być kwestie metodologiczne. Poprawny opis procesów rozpraszania jest bardzo trudny, gdyż wymagany jest kwantowy opis układów z silną korelacją między cząstkami. Rozważane układy to molekula czyli kilka jąder i wiele elektronów oraz powiedzmy jeden pozyton. Znalezienie dokładnych funkcji falowych dla takich układów jest zadaniem niezmiernie trudnym. Metody stosowane przez Autora do opisu procesu rozpraszania to wieloskładnikowa metoda DFT (*Density Functional Theory*) oraz metoda molekularnej R-macierzy. Obie te metody są znane od dawna w chemii kwantowej i fizyce teoretycznej.

Wieloskładnikowa metoda DFT (*multicomponent DFT*) wprowadzona została w chemii kwantowej w 1982 roku w celu uwzględnienia jądrowych efektów kwantowych, a w fizyce w 1986 roku do opisu procesów z udziałem pozytonów. Wieloskładnikowość oznacza tu jednakowe, kwantowomechaniczne traktowanie kilku różnych rodzajów (składników) cząstek elementarnych w rozpatrywanym układzie. Dla przykładu, w molekuale elektrony i niektóre jądra atomowe (najczęściej protony) opisywane są kwantowomechanicznie, a pozostałe jądra traktowane są jako nieruchome ładunki punktowe (przybliżenie adiabatyczne, przybliżenie Borna-Oppenheimera). Tu jeden składnik to elektrony, a drugi to kwantowe protony. W przypadku układów badanych przez Habilitanta, czyli molekula plus pozyton, elektrony molekuly i pozyton opisywane są kwantowomechanicznie, a wszystkie jądra atomowe to nieruchome ładunki punktowe. To też jest przykład metody dwuskładnikowej. W chemii kwantowej takie podejście znane jest również pod nazwą *Nuclear-Electronic Orbital* (NEO). W wieloskładnikowej metodzie DFT obok standardowych elektronowych potencjałów wymiennie-korelacyjnych wprowadza się również potencjały korelacyjne dla pozostałych, kwantowo traktowanych cząstek elementarnych (np. potencjał korelacji protonowej i protonowo-elektronowej czy też korelacji pozytonowej i pozytonowo-elektronowej).

W swoich badaniach dr Franz używał dwuskładnikowej metody DFT. Wyniki uzyskane przez Autora tą metodą dla małych molekuł oraz rozwinięcie samej metody przedstawione zostało w sześciu pracach cyklu habilitacyjnego (H1, H4, H9-12). Należy podkreślić wkład metodologiczny Autora obejmujący

skonstruowanie czterech nowych potencjałów korelacji pozyton-elektron (H12) oraz opracowanie metody rozwiązania równania Schrodingera z zespolonym potencjałem absorpcyjnym (H9). Takie potencjały pozwalają na obliczanie przekrojów czynnych dla takich procesów jak jonizacja atomów i molekuł poprzez zderzenia z pozytonami (i elektronami) czy też reakcji powstawania pozytonium.

W czterech kolejnych pracach H5, H6, H7, H8 przedstawiono wyniki obliczeń przekrojów czynnych dużych biocząsteczek na rozpraszanie pozytonów. Zastosowanie dwuskładnikowej metody DFT do tak dużych układów wymagało bardzo dużych mocy obliczeniowych. Ponadto, z powodu dużego momentu dipolowego biocząsteczek, konieczne było uwzględnienie tego efektu w obliczeniach przekrojów czynnych. To wymagało wprowadzenia dodatkowych poprawek do teorii. Autor wyprowadził takie poprawki i dokonał ich implementacji numerycznej co zostało opisane w pracy H8.

Druga ze stosowanych przez Habilitanta metod obliczeniowych to metoda R-macierzy. Ta metoda opracowana została do opisu reakcji jądrowych już w 1947 roku. W roku 1957 metodę tę zaadaptowano do opisu procesu rozpraszania elektronów, pozytonów i fotonów na atomach, a w latach 70-tych na cząsteczkach. Jednakże pierwsze wersje tej metody mogły być stosowane do opisu procesów rozpraszania pozytonów na molekułach tylko dwuatomowych.

Habilitant wniósł bardzo znaczący wkład w rozwój metody R-macierzy. Opracował nową wersję tej metody pozwalającą opisywać rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach wieloatomowych i napisał odpowiedni program komputerowy. W programie tym użył orbitali typu gaussowskiego w miejsce poprzednio stosowanych orbitali Slatera. Dzięki temu mógł zastosować w swoim programie bardzo efektywne algorytmy obliczania wielocentrowych całek dwuelektronowych używane od lat w chemii kantowej.

Drugim, istotnym wkładem Autora do teorii R-macierzy jest użycie jawnie skorelowanych funkcji falowych w opisie rozpraszania pozytonów na molekułach. Ponieważ w układzie cząsteczka-pozyton występuje bardzo silna korelacja elektron-pozyton, to jej poprawne uwzględnienie jest kluczowe dla dokładności rezultatów. W tym celu Autor zaproponował użycie funkcji falowych zależnych bezpośrednio od odległości pozyton-elektron. Jest to pomysł zaczerpnięty z chemii kwantowej, gdzie Kutzelnigg wprowadził funkcje falowe zależne jawnie od odległości elektron-elektron, co wcale nie umniejsza wkładu własnego Habilitanta.

Osiągnięcia Autora w zakresie teorii R-macierzy przedstawione zostały w dwóch pracach H2 i H3 cyklu habilitacyjnego.

Podsumowując ocenę rozprawy habilitacyjnej mogę z przekonaniem stwierdzić, że Habilitant wniósł duży i znaczący wkład w rozwój teorii rozpraszania pozytonów na molekułach.

Na zakończenie mam dwie uwagi niemerytoryczne. Pierwsza dotyczy poprawności językowej: Autor chyba dwukrotnie używa a Autoreferacie sformułowania: "obliczenia cząsteczek". To jest oczywiście niepoprawne, to jest jakiś slang, którego należy unikać. Cząsteczek się nie oblicza, dla nich obliczenia się wykonuje. Druga uwaga dotyczy terminu "*złożone potencjały absorbcyjne*", które to potencjały są naprawdę *zespólone* (przez co i złożone).

3. Ocena dorobku naukowego

Łączny dorobek naukowy Habilitanta to 31 prac opublikowanych (w zdecydowanej większości) w dobrych czasopismach takich jak Journal of Chemical Physics czy też Physical Review A. Jest On również co-edytorem jednej monografii.

Formalna, scientometryczna ocena dorobku naukowego Habilitanta wygląda następująco

liczba publikacji	31
sumaryczny impact factor	57
liczba cytowań	330
indeks Hirscha	10

To są wyniki bardzo dobre, lepsze od średnich statystycznego habilitanta (w dziedzinie chemii). Według moich danych, najczęściej składanych wniosków habilitacyjnych ma w dorobku 20-25 publikacji, 45-55 sumaryczny IF, 100-150 cytowań oraz indeks Hirscha 7.

Na dorobek naukowy Habilitanta składa się również Jego aktywność konferencyjna. I w tym punkcie Pan dr Franz może poszczycić się dużymi

osiągnięciami. Wygłosił 22 wykłady na zaproszenie, między innymi w Polsce, we Włoszech, Niemczech, Szwecji, Anglii, Japonii i Korei Południowej. Swoje wyniki prezentował w formie wykładów na 11 konferencjach europejskich, a także przedstawił je 32 razy w formie posterowej. Należy również dodać, że recenzował 15 publikacji naukowych dla siedmiu czasopism zagranicznych co dowodzi, że uznawany jest za eksperta w swojej dziedzinie.

W ocenie dorobku naukowego habilitanta należy również wziąć pod uwagę "kierowanie i udział w międzynarodowych i krajowych projektach badawczych". Otóż zgodnie z dokumentacją habilitacyjną dr Franz był w latach 2005-2016 dziesięciokrotnie kierownikiem krótkoterminowych projektów badawczych finansowanych przez European Science Foundation w ramach European Cooperation in Science and Technology (COST). Pięciokrotnie kierował również realizacją międzynarodowych grantów finansowanych przez National Research Council of Italy. Obecnie kieruje realizacją dwóch grantów obliczeniowych we współpracy z ośrodkami polskimi (Wrocław i Gdańsk). Jest również podwykonawcą w projekcie "Rozpraszanie nisko-energetycznych elektronów i pozytonów na atomach i molekułach – eksperyment i teoria" finansowanym przez Narodowe Centrum Nauki. W tym obszarze działalności Habilitant też wypada bardzo dobrze.

Dr Jan Franz prowadził (i zapewne wciąż prowadzi) bardzo ożywioną współpracę naukową z wieloma ośrodkami zagranicznymi. W dokumentacji habilitacyjnej znaleźć można listę trzynastu uniwersytetów, w których Habilitant odbywał krótsze bądź dłuższe staże naukowe. Są to placówki akademickie w Europie, Indiach, Japonii i Korei Południowej.

Podsumowując, z przyjemnością stwierdzam, że osiągnięcia naukowe Habilitanta są w każdym aspekcie ponad przeciętne. Zarówno liczba publikacji jak i rezonans jaki te pracy wywołały (liczba cytowań), aktywność konferencyjna, ożywiona współpraca międzynarodowa oraz kierownictwo w realizacji licznych grantów składają się w mojej ocenie na bardzo imponujący dorobek naukowy.

4. Ocena działalności dydaktycznej

Z dokumentacji habilitacyjnej wynika, dr Franz prowadzi od roku 2013 do chwili obecnej szereg zajęć dydaktycznych na Wydziale Fizyki Technicznej i

Matematyki Stosowanej Politechniki Gdańskiej. Są to dwa wykłady prowadzone w języku angielskim oraz związane z nimi zajęcia laboratoryjne z przedmiotów *Computational Chemistry* i *Object Oriented Programming III*.

Ponadto Habilitant prowadzi dodatkowe zajęcia laboratoryjne do pięciu innych przedmiotów: *Concurrent and Parallel Programming*, *Optimization of Databases*, *Procedural Programming I*, *Introduction to Numerical Methods* oraz *Fundamentals of Operating Systems and Programming*.

Do wszystkich tych zajęć opracowane zostały z udziałem Habilitanta odpowiednie materiały dydaktyczne oraz kursy typu *online* zawierające ćwiczenia z przykładami i rozwiązaniami. Wszystko to wygląda bardzo profesjonalnie.

W roku 2013 dr Franz opracował materiały dydaktyczne w języku niemieckim do przedmiotów Engineering Mechanics II i III wykładanych w Institute for Automotive Engineering na uniwersytecie w Kolonii. W latach 2005-2009 opracował również materiały dydaktyczne dla początkujących studentów fizyki Wydziału Fizyki i Astronomii w University College w Londynie.

W początkach swojej kariery akademickiej (1999-2004) prowadził w Institute for Physical and Theoretical Chemistry uniwersytetu w Bonn wykład i seminarium z przedmiotu Quantum Chemistry.

Habilitant ma również za sobą dziesięciomiesięczny okres związany z nauczaniem fizyki, matematyki, chemii i informatyki w dwóch szkołach średnich w Niemczech w latach 2011-2013.

Od roku 2013 Pan dr Franz był promotorem pięciu prac inżynierskich na Politechnice Gdańskiej. Był również promotorem pomocniczym jednego doktoratu na University College London.

Bogaty dorobek dydaktyczny Habilitanta oceniam bardzo wysoko.

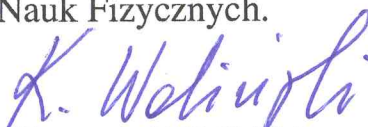
5. Ocena działalności organizacyjnej

Działalność organizacyjna Habilitanta jest również bardzo bogata. Uczestniczył w kilku projektach europejskich (COST Actions). Był członkiem komitetu zarządzającego projektem Electron Controlled Chemical Lithography (ECCL). W Latach 1999-2015 uczestniczył jako członek w pracach dwóch grup eksperckich Niemieckiego Towarzystwa Chemicznego. W ostatnich latach był członkiem komitetów organizacyjnych kilku konferencji międzynarodowych. W roku 2015 i 2014 był dwukrotnie laureatem zespołowej nagrody Rektora Politechniki Gdańskiej za wyróżniającą działalność organizacyjną.

6. Podsumowanie

Na podstawie szczegółowej analizy autoreferatu, trzynastu prac składających się na rozprawę habilitacyjną oraz pozostałych publikacji dr Jana Franza mogę z przekonaniem stwierdzić, że jest On bardzo dobrym specjalistą w dziedzinie chemii teoretycznej i fizyki obliczeniowej. Wszystkie Jego prace dowodzą gruntownej znajomości obliczeniowych metod fizyki teoretycznej i chemii kwantowej. Chciałbym podkreślić, że nie chodzi tu o rutynowe zastosowania dostępnych programów obliczeniowych. Dr Franz opracował formalizm matematyczny nowych metod oraz dokonał modyfikacji istniejących oraz samodzielnie napisał odpowiednie programy komputerowe. Stanowi to w mojej opinii istotny wkład w rozwój obliczeniowych metod fizyki i chemii teoretycznej. Przy użyciu opracowanych przez siebie narzędzi przeprowadził następnie cały szereg obliczeń uzyskując bardzo ciekawe rezultaty. Dlatego też wysoko oceniam zarówno Jego rozprawę habilitacyjną jak i pozostałe prace z zakresu chemii kwantowej.

Przy nadawaniu tytułu naukowego doktora habilitowanego oprócz rozprawy habilitacyjnej należy wziąć pod uwagę także ogólny dorobek naukowy kandydata jak również dorobek dydaktyczny i organizacyjny. Obydwa te dodatkowe kryteria są w przypadku dr Jana Franza spełnione z nadmiarem. Dlatego też z głębokim przekonaniem wnioskuję o nadanie dr Janowi Franzowi tytułu doktora habilitowanego w dziedzinie Nauk Fizycznych.


Krzysztof Woliński