

dr hab. Paweł Możejko, prof. nadzw. PG
Katedra Fizyki Atomowej, Molekularnej i Optycznej
Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej
Politechnika Gdańska
ul. Gabriela Narutowicza 11/12,
80-233 Gdańsk

Gdańsk, 12.09.2018

POLITECHNIKA GDAŃSKA WYDZIAŁ FIZYKI TECHNICZNEJ I MATEMATYKI STOSOWANEJ	
Wpłynęło dnia	12.09.2018
L. dz.	51/WFTiMS/SN/2018
Zał.	—

Recenzja rozprawy habilitacyjnej
pt. „Teoretyczne metody opisu zderzeń pozytonów z cząsteczkami”
oraz ocena dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego
dr Jana Franza w związku z postępowaniem o nadanie mu
stopnia doktora habilitowanego

1.) Sylwetka dr Jana Franza

Habilitant - dr Jan Franz studiował na Wydziale Matematyki i Nauk Przyrodniczych, Uniwersytetu Fryderyka Wilhelma w Bonn, uzyskując w 1999 roku stopień magistra chemii na podstawie pracy magisterskiej zatytułowanej „*Badanie elektronowych stanów wzbudzonych liniowych klastrów węgla C_5 i C_7* ”, której promotorem była Profesor dr hab. Sigrid Peyermihoff. W 2003 roku habilitant uzyskał, na tej samej uczelni, stopień doktora nauk przyrodniczych, broniąc rozprawę doktorską „*Efektywne operatory Hamiltona w przybliżonych obliczeniach korelacji elektronowej w cząsteczkach - teoria, implementacja i zastosowanie*”, której promotorem również była Pani Profesor Sigrid Peyermihoff. Po uzyskaniu stopnia doktora, habilitant pracował jako asystent naukowy, pracownik naukowy i naukowiec wizytujący na Uniwersytecie Fryderyka Wilhelma w Bonn, Uniwersytecie Ruprechta i Karola w Heidelbergu, Narodowym Uniwersytecie Seulskim, Uniwersytecie Rzymskim „La Sapienza”, Uniwersytecie College London, Uniwersytecie w Göteborgu i Uniwersytecie Nauk Stosowanych w Kolonii, przy czym okresy zatrudnienia wahały się od kilku miesięcy do kilku lat. Przez półtora roku habilitant pracował jako nauczyciel w szkole średniej. Od października 2013 roku, dr Jan Franz jest adiunktem w Katedrze Fizyki Teoretycznej i Informatyki Kwantowej na Wydziale Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej, Politechniki Gdańskiej.

2.) Ocena osiągnięcia naukowego (rozprawy habilitacyjnej) dr Jana Franza

Jako osiągnięcie naukowe dr Jan Franz wskazał cykl trzynastu publikacji (H1-H13) z lat 2006-2017 zatytułowany: „*Teoretyczne metody opisu zderzeń pozytonów z cząsteczkami*”. Cztery z tych prac są autorstwa habilitanta. W pozostałych dziewięciu pracach jest ich współautorem, przy czym w siedmiu z nich jest pierwszym autorem. Prace H1 oraz H4-H13 opublikowane zostały w indeksowanych (JCR) czasopismach naukowych o międzynarodowym zasięgu, takich jak *Physical Review A* (3 prace), *Journal of Chemical Physics* (1 praca), *Journal of Mathematical Physics* (1 praca), *Acta Physica Polonica* (1 praca), *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* (1 praca) oraz *European Physical Journal D* (4 prace). Dwie prace (H2 i H3) opublikowane zostały w monografiach zbiorowych. Według załączonych do dokumentacji oświadczeń współautorów udział dr Jana Franza w powstanie prac cyklu habilitacyjnego jest wiodący. Odpowiednio 70% w pracach H5, H6 i H8, 65% w pracy H1, 55% w pracy H4, 50% w pracach H2 i H7 oraz 40% w pracach H10 i H11.

Pamiętając, że tak zwane parametry bibliometryczne nie przesądzają o jakości pracy naukowej, odnotować należy, że prace z cyklu habilitacyjnego, do dnia złożenia rozprawy, były cytowane 72 razy. Sumaryczny wskaźnik oddziaływania (tzw. impact factor) dla prac habilitacyjnych wynosi 19,316. Całkowita liczba cytowań wszystkich prac habilitanta według bazy Web of Science jest równa 330, a indeks Hirscha wynosi 10 (dane na dzień złożenia rozprawy) co w obszarze badań prowadzonych przez habilitanta jest wynikiem zadowalającym na tym etapie kariery naukowej.

Tematyka prac z ocenianego cyklu publikacji mieści się w obszarze badań oddziaływania nisko-energetycznych cząstek naładowanych z atomami i cząsteczkami. Mimo, że badania tych procesów, w szczególności w kontekście rozpraszania elektronów, są prowadzone od początku XX wieku, tematyka ta jest wciąż aktualna. Wydajności procesów oddziaływania cząstek naładowanych, w tym pozytonów i elektronów, są szczególnie istotne w aspekcie opisu i modelowania oddziaływania promieniowania jonizującego z układami biologicznymi oraz procesów astrobiologicznych. Pozytony są szeroko wykorzystywane w diagnostyce i terapii medycznej oraz badaniach materiałowych.

Prace habilitanta dotyczą teoretycznego opisu oddziaływania pozytonów z układami molekularnymi i koncentrują się zarówno na obliczeniach numerycznych wydajności procesów rozpraszania, jak i na rozwoju i udoskonaleniu metod tych obliczeń. Są one z jednej strony komplementarne do prac eksperymentalnych, z drugiej strony po zweryfikowaniu ich poprawności mogą być wykorzystywane do badania układów, które ze względu na specyficzne trudności

eksperymentalne (toksyczność, nietrwałość związków chemicznych w warunkach doświadczalnych itd.) są poza zasięgiem prac doświadczalnych.

W cyklu prac habilitacyjnych H1-H13 można wyróżnić trzy części: prace dotyczące zastosowań metody R-macierzy w procesach rozpraszania pozytonów na cząsteczkach wieloatomowych (prace H2 i H3), oddziaływania pozytonów z cząsteczkami o znaczeniu biologicznym (prace H5-H8) oraz wykorzystaniu potencjałów modelowych i metod hybrydowych w opisie oddziaływania pozytonów z atomami i prostymi cząsteczkami (prace H1, H4, H9-H12).

W pracy H2 zaprezentowano ogólny zarys metody R-macierzy w zastosowaniu do badań oddziaływań elektronów i pozytonów z cząsteczkami. Wskazano na konieczność uwzględnienia korelacji pomiędzy powolnym pozytonem i elektronami tarczy. Zaprezentowano w niej testowe wyniki obliczeń przekroju czynnego na rozpraszanie nisko-energetycznych pozytonów na cząsteczce N_2 oraz krzywe energii potencjalnej cząsteczki LiH oraz stanu pozytonium e^+HLi przy wykorzystaniu zmodyfikowanego oprogramowania implementującego metodę R-macierzy, opracowanego w grupie profesora Jonathana Tennysona (UK molecular R-matrix code). Modyfikacja ta miała umożliwić obliczenia tego typu dla oddziaływania pozytonów z układami wieloatomowymi. Kontynuacją tego zagadnienia jest praca H3, w której habilitant rozważa zagadnienie wykorzystania jawnie skorelowanych funkcji falowych układu elektron-pozyton w teoretycznych badaniach oddziaływania pozytonów z cząsteczkami., w tym takich funkcji które w sposób jawny zależą od współrzędnej opisującej ich wzajemne położenie. Omówiona jest też w niej możliwość i sposób odpowiedniej implementacji numerycznej. Obie prace, opublikowane zostały w zbiorowych pracach monograficznych i zawierają dosyć skrótową oraz ogólną informację o zaimplementowanych zmianach. Na znaczący wkład w modyfikację wspomnianego wyżej oprogramowania, habilitant wskazuje w załączonej dokumentacji. Najważniejsze zmiany polegały na zastąpieniu orbitali typu Slatra (STO) orbitalami typu Gaussa (GTO), odpowiedniej adaptacji spinowej funkcji falowych opisujących zagadnienie oddziaływania układów wieloelektronowych z pozytonami oraz optymalizacji algorytmu wyznaczania elementów macierzy hamiltonianu układów elektron-pozyton. Zastosowanie zmodyfikowanego oprogramowania do badania oddziaływania pozytonów z układami wieloatomowymi takimi jak H_2O , CO_2 czy też acetylen zaprezentowane jest w pracach P8, P9 i P11. Obliczone w pracach P8 oraz P9 przekroje czynne na rozproszenie powolnych pozytonów na cząsteczkach wody i dwutlenku węgla pozostają w dobrej zgodności z danymi doświadczalnymi i wskazują na dobry kierunek rozwoju omawianej metody i jej numerycznej implementacji. Prace te

opublikowane zostały w szeroko dostępnych czasopismach naukowych. Szkoda, że Autor nie zdecydował się na dołączenie ich do cyklu publikacji habilitacyjnych. Na taką możliwość, w sposób naturalny, wskazuje wysoki, deklarowany przez habilitanta, udział w ich powstanie oraz ich omówienie, w części autoreferatu dotyczącej prac H2 i H3.

Interesującą częścią cyklu habilitacyjnego są prace H5-H8, w których habilitant zaprezentował wyniki obliczeń przekrojów czynnych na rozpraszanie nisko-energetycznych pozytonów (o energiach poniżej 25 eV) na cząsteczkach o znaczeniu biologicznym. W pracy H5 i H6 obliczone zostały różniczkowe przekroje czynne oraz całkowity (integral) przekrój czynny na rozproszenie pozytonów na cząsteczkach tetrahydrofuranu oraz pirymidyny w kanale sprężystym. W pracy H7 przedstawiono podobne wyniki, w tym również dla kanału niesprężystego, dla jednej z zasad RNA – uracylu, natomiast w pracy H8 zaprezentowane zostały całkowite przekroje czynne oraz przekroje na przekaz pędu dla zasad DNA – adeniny, guaniny, tyminy oraz cytozyny. Obliczenia wykonane zostały przez habilitanta we współpracy z grupą prof. Franco Gianturco przy użyciu metod funkcjonału gęstości oraz metody rozwinięcia jednocentrowego (SCE) i oprogramowania VOLSCAT oraz POLYDCS. Zastosowanie tego oprogramowania do cząsteczek o stosunkowo złożonej symetrii, zbudowanych z dużej liczby atomów, oraz posiadających dość duży trwały moment dipolowy wymagało od habilitanta jego znaczącej modyfikacji. Wyniki dla cząsteczek tetrahydrofuranu, pirymidyny oraz uracylu porównano z wynikami doświadczalnymi. Autorzy zaproponowali również, w oparciu o uzyskane przez nich różniczkowe przekroje czynne, korekcję wyników eksperymentalnych, uzyskanych w metodzie transmisyjnej, które ze względu na efekt rozpraszania sprężystego do przodu oraz w kierunku małych kątów rozpraszania, są zazwyczaj zaniżone. Wskazana przez autorów korekcja pozwala na uzyskanie bardzo dobrej zgodności z wynikami doświadczalnymi. W tym miejscu należy zaznaczyć, że zaobserwowana przez autorów rozbieżność może mieć więcej źródeł. Dane eksperymentalne mogą być obarczone niepewnościami w pomiarze koncentracji badanych cząsteczek w obszarze rozpraszania. W przypadku uracylu, który występuje w warunkach normalnych w fazie stałej i ma stosunkowo wysoką temperaturę wrzenia niepewności te mogą być bardzo duże. Z drugiej strony obliczone przez autorów różniczkowe przekroje czynne oraz całkowite przekroje czynne, bez uwzględnienia wkładu w rozpraszanie, trwałego momentu dipolowego, oszacowanego w przybliżeniu Borna, pozostają w zadowalającej zgodności z większością cytowanych danych doświadczalnych. Znajomość danych typu przedstawionego w pracach H5-H8 jest niezbędna w szczegółowych symulacjach oddziaływania jonizującego z układami biologicznymi.

Kolejna część cyklu prac habilitacyjnych dotyczy wykorzystania potencjałów modelowych i metod hybrydowych w opisie oddziaływania pozytonów z atomami i prostymi cząsteczkami. W pracy H1 przedstawione są wyniki obliczeń stałej szybkości anihilacji pozytonów w gazach dwuatomowych, a w pracy H4 badano niesprężyste rozpraszanie pozytonów i elektronów na cząsteczce CF_4 . Prace H10 i H11 są wynikiem współpracy habilitanta z prof. Grzegorzem Karwaszem i dr hab. Kamilem Fedusem z UMK w Toruniu. W pracy H10 analizowane są doświadczalne wyniki rozpraszania pozytonów na cząsteczkach H_2 w porównaniu z obliczonymi przekrojami czynnymi. W obliczeniach teoretycznych zastosowano półempiryczną zmodyfikowaną metodę efektywnego zasięgu (MERT) oraz metody funkcjonału gęstości. Główny wkład habilitanta, w powstanie tej publikacji, polegał na obliczeniu przekrojów czynnych przy użyciu ostatniej ze wspomnianych metod. Praca H11 poświęcona jest w zasadzie obliczeniom sprężystego przekroju czynnego na rozproszenie pozytonów na atomach argonu oraz kryptonu i cząsteczkach N_2 oraz CH_4 . W obliczeniach wykorzystana została metoda funkcjonału gęstości przy czym do opisu oddziaływania pozytonów z badanymi układami wykorzystany został modelowy długozasięgowy potencjał polaryzacyjny zaproponowany przez habilitanta. Modelowe potencjały tego typu, opisujące oddziaływania korelacyjne i polaryzacyjne zostały zaprezentowane i wyprowadzone przez habilitanta w pracy H12. Praca H9 dotyczy niesprężystych procesów rozproszeniowych, w których oddziaływanie może być przybliżone potencjałem zespolonym. Wyprowadzone w niej zostały wyrażenia implementowalne w numerycznych obliczeniach przekrojów czynnych.

Ostatnia wskazana w cyklu praca (H13) prezentuje strukturę projektowanej przez Autora bazy danych POCOBIO zawierającej dane obliczeń teoretycznych dla wybranych procesów oddziaływania pozytonów z cząsteczkami. Takie upowszechnienie i uzupełnienie już prezentowanych wyników jest cenne i może pobudzać środowisko naukowe do dalszych prac. Szkoda tylko, że Autor rezygnuje w projektowanej bazie danych z umieszczania danych eksperymentalnych i ich porównania z teorią. Ma to zapewnić jak czytamy w pracy H13 spójność danych. Z drugiej strony uwzględniając chociażby rozbieżność wartości obliczonych przez Autora przekrojów czynnych na rozpraszanie pozytonów na cząsteczkach uracylu z danymi doświadczalnymi Surdutovicha i współprac. (2008) porównanie takie może dostarczyć cennych informacji o bieżącym stanie prac doświadczalnych i dokładności metod teoretycznych.

Przedstawiony przez dr Jana Franza dorobek w ogólności uznać należy za spójny tematycznie. Wnosi on też istotny wkład w zagadnienie rozpraszania pozytonów na cząsteczkach wieloatomowych.

Prace dr Jana Franza dostarczyły wartościowe dane dotyczące oddziaływania pozytonów z cząsteczkami wieloatomowymi w tym układami o znaczeniu biologicznym. Habilitant ma również wkład w rozwój oprogramowania do obliczeń procesów opisujących oddziaływania cząsteczek z nisko-energetycznymi pozytonami oraz w rozwoju metod teoretycznych opisujących te zagadnienia. Oceniany cykl publikacji H1-H13, wskazany przez dr Jana Franza, spełnia kryteria osiągnięcia naukowego.

3.) Ocena pozostałej działalności naukowej dr Jana Franza

Pozostały dorobek naukowy dr Jana Franza obejmuje 17 artykułów opublikowanych w recenzowanych międzynarodowych periodykach naukowych. Jedna z tych prac opublikowana została przed uzyskaniem stopnia doktora, pozostałe prace obejmują okres od 2005 do 2016 roku. Prace te dotyczą następujących zagadnień: badania stanów elektronowego wzbudzenia cząsteczek, oddziaływania pozytonów i elektronów z cząsteczkami oraz wykorzystania metod perturbacyjnych zależnych od czasu w badaniu układów wieloatomowych.

W pracy P2 opartej, na wynikach rozprawy doktorskiej habilitanta, zaprezentowane jest uogólnienie metody MP2 pozwalające na obliczania stanów wzbudzenia elektronowego układów otwartopowłokowych, natomiast praca P1 zawiera wyniki obliczeń widma elektronowego cząsteczki 7-hydroksychinoliny, przy wykorzystaniu implementacji tej metody (metoda MSMRMP2). Prace P10 i P12 również dotyczą implementacji metody MSMRMP2, odpowiednio w badaniach fotoindukowanego transferu protonu w uwodnionej 6-hydroksychinolinie oraz fotodysocjacji wody utlenionej.

Publikacje P3, P4, P8-P9, P11 oraz P16-P17 dotyczą badania oddziaływania elektronów i pozytonów z cząsteczkami wieloatomowymi, w tym metodami prezentowanymi przez Autora w cyklu publikacji z osiągnięcia habilitacyjnego. Jak wspomniano wcześniej, szkoda, że przynajmniej część z nich nie została do tego cyklu włączona.

Prace P5-P7 oraz P14 i P15 dotyczą wykorzystania metod perturbacyjnych zależnych od czasu w badaniu układów wieloatomowych (badanie dynamiki rodnika fluorobenzenu w procesie jonizacji ultraszybkim impulsem laserowym) jak i cząsteczek dwuatomowych (badanie reakcji tworzenia układów dwuatomowych).

Część z powyższych prac wskazuje na szerszy zakres tematyczny prowadzonych przez dr Jana Franza badań naukowych, wykraczający poza tematykę ocenianej rozprawy habilitacyjnej. Dorobek ten nie budzi zastrzeżeń recenzenta.

Dr Jan Franz aktywnie uczestniczył w konferencjach międzynarodowych i krajowych, na których wygłosił 11 referatów oraz prezentował ponad 20 posterów. Habilitant wygłosił również ponad 20 wykładów zaproszonych na seminariach, w wielu krajowych i zagranicznych ośrodkach uniwersyteckich. Tą aktywność w upowszechnianiu uzyskanych wyników badań należy ocenić pozytywnie.

4.) Ocena dorobku dydaktycznego i organizacyjnego dr Jana Franza

Habilitant - dr Jan Franz w swoim dorobku dydaktycznym może pochwalić się zarówno pracą w charakterze nauczyciela w szkole średniej (nauczanie fizyki, chemii, nauk przyrodniczych, matematyki oraz informatyki w szkole Europaschule Bornheim and Marienschule Euskirchen w Niemczech) jak i pracą jako nauczyciel akademicki w Instytucie Chemii Fizycznej i Teoretycznej na Uniwersytecie w Bonn oraz na Wydziale Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechniki Gdańskiej. Prowadzone wykłady, laboratoria oraz seminaria obejmują szerokie spektrum przedmiotów od chemii kwantowej poprzez chemię obliczeniową, matematykę dla chemików, programowanie współbieżne i równoległe, programowanie obiektowe, proceduralne języki programowania po optymalizację baz danych. Do większości z tych zajęć habilitant przygotował również pomocnicze materiały dydaktyczne, umieszczone w repozytoriach uczelni.

Opieka naukowa nad studentami i doktorantami dr Jana Franza obejmuje pięć zakończonych obroną prac inżynierskich na Wydziale Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechniki Gdańskiej oraz opiekę w charakterze opiekuna naukowego/promotora pomocniczego doktoranta na Uniwersytecie College London w Wielkiej Brytanii. Mimo, że w przedstawionym wykazie brak jest dokumentu potwierdzającego ten ostatni fakt, to wynika on bezsprzecznie z samej rozprawy doktoranta Rui Zhang'a, który wskazuje w podziękowaniach dr Jana Franza jako opiekuna (the second supervisor). Działalność popularyzatorska dr Jana Franza obejmuje kurs dla młodych naukowców w ramach szkolenia *European Winter School on Theoretical Methods in Quantum Scattering Theory* (2005) oraz dwóch wykładów popularnonaukowych wygłoszonych w 2010 i 2011 roku.

Aktywność organizacyjna habilitanta jest wystarczająca: współuczestnictwo w organizowaniu kilku międzynarodowych konferencji naukowych oraz kierowanie i zarządzanie grantami obliczeniowymi uzyskanymi we Wrocławskim Centrum Sieciowo-Komputerowym oraz w Trójmiejskiej Akademickiej Sieci Komputerowej.

Za pracę dydaktyczną oraz działalność organizacyjną na Politechnice Gdańskiej dr Jan Franz był nagradzany nagrodami Rektora PG.

Wobec powyższego moja całościowa ocena dorobku dydaktycznego, opieki nad dyplomantami, działalności popularyzatorskiej oraz organizacyjnej jest pozytywna.

6.) Wnioski końcowe

Uwzględniając jakość wskazanego przez dr Jana Franza osiągnięcia naukowego jak i pozostałego dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego habilitanta, z pełnym przekonaniem stwierdzam, że dr Jan Franz spełnia wymagania, wynikające z *Ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki* z dnia 14 marca 2003 roku wraz z późniejszymi zmianami, odnoszące się do rozpraw habilitacyjnych i wnoszę o dopuszczenie dr Jana Franza do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

