

Prof. dr hab. Maria Jaworska
Instytut Chemii
Wydział Matematyki, Fizyki i Chemii
Uniwersytet Śląski w Katowicach
Ul. Szkolna 9
40-006 Katowice



Ocena aktywności naukowej dr Tomasza Wąsowicza oraz jego osiągnięcia naukowego zatytułowanego „Dysocjacja cząsteczek heterocyklicznych w absorpcji promieniowania w zderzeniach z jonami” w związku z postępowaniem o nadanie mu stopnia doktora habilitowanego

1. Najważniejsze fakty z życiorysu zawodowego Habilitanta

Stopnie naukowe

2002 - stopień magistra fizyki z informatyką uzyskany w Instytucie Fizyki Teoretycznej i Astrofizyki na Wydziale Matematyki, Fizyki i Informatyki Uniwersytetu Gdańskiego uzyskany pod kierunkiem prof. Roberta Głębockiego.

2006 - stopień doktora nauk fizycznych w zakresie fizyki - Instytut Fizyki Doświadczalnej, Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki Uniwersytetu Gdańskiego. Tytuł pracy : „Badania struktury linii i prawdopodobieństw przejść promienistych w widmie ołowiu”. Promotorem pracy był prof. Jerzy Kwela.

Przebieg pracy zawodowej

2 stycznia 2002- 1 lipca 2010 – specjalista w Instytucie Fizyki Doświadczalnej, Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki, Uniwersytet Gdański.

Od 1 września 2008 – adiunkt w Katedrze Fizyki Zjawisk Elektronowych, Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej, Politechnika Gdańska

2. Ocena osiągnięcia naukowego (rozprawy habilitacyjnej) dr Tomasza Wąsowicza

Na osiągnięcie naukowe składa się cykl ośmiu publikacji w czasopismach takich jak: Phys. Rev. A, J. Chem. Phys., J. Phys. B, J. Phys. Chem. A, Eur. Phys. J., o IF od 1,208 do 3,122. W siedmiu z nich Habilitant jest pierwszym autorem. W trzech Autor ocenia swój wkład na 95%, w jednej na 75%, w dwóch na 70%, w jednej na 60% i w jednej na 50%. Dołączone są odpowiednie oświadczenia współautorów publikacji.

Publikacja H1 dotyczy fotofragmentacji cząsteczki tetrahydrofuranu pod wpływem promieniowania synchrotronowego o energii 14 – 68 eV. W wyniku rozpadu THF powstają wzbudzone fragmenty takie jak atom wodoru, grupy CH i C₂. Procesy fragmentacji które zachodzą w THF mogą być odniesione do biomolekuł zawierających pierścień furanozowy, takich jak zasady nukleinowe adenina i guanina.

W publikacji H2 badano rozpad cząsteczki izoksazolu pod wpływem promieniowania synchrotronowego o energii 16-50 eV, prowadzący do powstawania wzbudzonych fragmentów takich jak atomy wodoru, CH, CN i C₂. Fragmentacja następuje z wysoko wzbudzonych stanów Rydbergowskich izoksazolu z których rozpad może zachodzić różnymi kanałami. W rozważanych mechanizmach fragmentacji następuje migracja atomu wodoru w cząsteczce izoksazolu. Powstawanie grupy nitrylowej stwierdzono również przy napromieniowywaniu pochodnych uracylu elektronami. Tak więc produkt ten może być typowy dla rozpadu cząsteczek biologicznych poddanych działaniu promieniowania.

Publikacja H3 dotyczy badania rozpadu cząsteczki izoksazolu, poddanej działaniu promieniowania synchrotronowego, za pomocą indukowanej fotonami spektroskopii

fluorescencyjnej. Częsteczka izoksazolu przechodzi na wysoko wzbudzone stany Rydbergowskie, z których następuje fragmentacja z utworzeniem rodników NH. Powstawanie tych rodników świadczy o tym, iż przed dysocjacją następuje migracja wodoru. Aby wyjaśnić mechanizm fragmentacji z utworzeniem rodników NH wykonano obliczenia teoretyczne za pomocą metod DFT i MP2 oraz szerokich baz funkcyjnych. Wyznaczono potencjały jonizacji izoksazolu z użyciem funkcji Greena. We wzbudzonym stanie Rydbergowskim elektron jest słabo związany z częsteczką, stąd obliczenia prowadzono dla kationu. Energetykę migracji wodoru wyznaczono zmieniając odległość N-O. Przy przejściu od struktury cyklicznej do otwartej następuje izomeryzacja i wodór wiąże się z azotem. Obliczenia kwantowochemiczne potwierdziły mechanizm migracji wodoru przed dysocjacją grupy NH.

W pracy H4 prowadzono badania dysocjacji częsteczki pirydyny na fragmenty pod wpływem promieniowania o energii w zakresie 17,5-50 eV z utworzeniem wzbudzonych atomów wodoru oraz grup NH. Na podstawie obliczeń teoretycznych metodą PMP2 wywnioskowano, iż eliminacja wodoru zachodzi ze struktury cyklicznej a nie otwartej. Obliczenia również wskazały, że najkorzystniejszy energetycznie jest transfer wodoru do azotu z węgla w położeniu γ .

W publikacji H5 użyto promieniowania synchrotronowego o zakresach 16-27 i 14.7-25 eV do badania dysocjacji częsteczek pirydyny i pirymidyny. W wyniku fotofragmentacji obu częsteczek powstają rodniki CN. Ustalono, że dysocjacja zachodzi z wysoko wzbudzonych stanów, po czym następuje otwarcie pierścienia i izomeryzacja. Rodniki CN powstają bezpośrednio lub z HCN przez oderwanie wodoru. Możliwa jest również autojonizacja stanów wzbudzonych i fragmentacja powstałych kationów. Pirydyna i pirymidyna są analogami biomolekuł i mogą posiadać podobne mechanizmy dysocjacji pod wpływem promieniowania VUV. Jedną z dróg dysocjacji może być uwalnianie rodników CN. Prebiotyczne częsteczki powstające w przestrzeni międzygwiazdnej byłyby niestabilne pod wpływem promieniowania i to tłumaczy dlaczego pomimo pomiarów widmowych nie są one obserwowane.

W pracy H6 badano zderzenia niskoenergetycznych kationów H^+ , C^+ i O^+ z częsteczkami tetrahydrofuranu, modelem jednostki dezoksyrybozy. Zbadano proces fragmentacji częsteczek THF na wzbudzone neutralne fragmenty. Zaobserwowane zostały fragmenty takie jak: wodór atomowy H, atomy węgla oraz dwuatomowe częsteczki CH. Wyniki pokazały, że mechanizm fragmentacji silnie zależy od kationów pocisku. Wysoka wydajność fragmentacji CH występującej przy niższych prędkościach w zderzeniach $C^+ + THF$ jest wskaźnikiem tworzenia kompleksu $[C-C_4H_8O]^+$ przed dysocjacją. Ponadto, bardzo wysokie wydajności wytwarzania wzbudzonych atomów wodoru i węgla w zderzeniach z H^+ i C^+ , sugerują, że procesy zderzeniowe są zdominowane przez przeniesienie elektronu z częsteczek tetrahydrofuranu do kationów. Wychwytywanie pojedynczego elektronu bez istotnej fragmentacji THF dominuje w oddziaływaniu $H^+ + THF$, podczas gdy w zderzeniach z C^+ i O^+ oprócz procesów wychwytywania elektronów zachodzi bardziej rozległa fragmentacja THF.

W pracy H7 zbadano oddziaływania protonów z częsteczkami furanu w fazie gazowej w zakresie energii 50-1000 eV. Wśród produktów zaobserwowano najwyższe wydajności dla wzbudzonych atomów H. Obserwacje te sugerują, że wzbudzone atomy wodoru powstają przez neutralizację i wzbudzanie protonów w wyniku procesu przeniesienia elektronu z częsteczek furanu lub THF do pocisków H^+ . Badania te mogą mieć zastosowanie w astrochemii, fizyce plazmy, medycynie.

W publikacji H8 badano zderzenia niskoenergetycznych kationów z pirydyną. Zderzenia takie indukują izomeryzację częsteczek. Zaobserwowano powstawanie wzbudzonych fragmentów NH w zderzeniach częsteczek pirydyny z kationami H^+ , H_2^+ , He^+ , He_2^+ i O^+ . Pojawienie się luminescencji z wzbudzonych wolnych rodników NH można uznać

za wskaźnik procesu przegrupowania związanego z migracją jednego z atomów wodoru przed wywołaną kationem dysocjacją. Ta reakcja najprawdopodobniej obejmuje przesunięcie wodoru z C (2) do N (1), z utworzeniem izomeru kationu pirydyny, a na końcu pęknięcie dwóch wiązań C-N z odłączeniem rodnika NH. Tworzenie fragmentów NH zależy od rodzaju kationu i prędkości kolizji. Tworzenie kompleksów pośrednich występuje w zderzeniach H_2^+ , He^+ i O^+ , podczas gdy wychwytywanie pojedynczego elektronu bez fragmentacji pirydyny dominuje w oddziaływaniu pirydyny i H^+ . Może to mieć znaczenie dla badania procesów molekularnych w wczesnych etapach uszkodzenia DNA przez naładowane cząstki w terapiach radiacyjnych.

Podsumowanie badań składających się na osiągnięcie naukowe.

W cyklu prac H1-H8 dr Tomasz Wąsowicz zaprezentował wyniki badań mających na celu wyjaśnienie mechanizmów fragmentacji cyklicznych cząsteczek organicznych pod wpływem promieniowania synchrotronowego o energii 14-70 eV i wiązek jonów dodatnich w zakresie energii 2-2000 eV. W badanych cząsteczkach pod wpływem promieniowania i zderzeń z jonami następuje jonizacja, przechodzenie do stanów wzbudzonych, izomeryzacja i rozpad na fragmenty. Do badań autor dysertacji habilitacyjnej wykorzystał metody spektroskopowe oraz obliczenia kwantowochemiczne. Obliczenia teoretyczne pozwoliły uzyskać wgląd w mechanizmy reakcji które zachodzą po przejściu do stanów wzbudzonych o wysokiej energii. Zostały wykonane przy użyciu metody MP2 lub PMP2, a wstępne obliczenia przeprowadzono metodą DFT. Potencjały jonizacji molekuł wyznaczano metodą funkcji Greena.

Pierwszym procesem który następuje po oddziaływaniu z promieniowaniem lub jonami dodatnimi jest wzbudzenie do wysoko położonych stanów Rydbergowskich. Przed rozpadem molekuł na fragmenty następuje izomeryzacja związana z migracją atomów wodoru od węgla do azotu. Z tych samych stanów wzbudzonych możliwy jest rozpad cząsteczki na różnych ścieżkach. Obliczenia pozwoliły na wskazanie pozycji atomów węgla z których następuje przeniesienie wodoru na azot. W zależności od energii promieniowania, obsadzone są różne stany wzbudzone, co z kolei wpływa na skład produktów fragmentacji. Daje to możliwość sterowania procesami fotodysocjacji.

Zderzenia jonów dodatnich z molekułami prowadzą do tych samych produktów reakcji, a mechanizm dysocjacji zależy od rodzaju kationu i jego energii. W zderzeniach następuje przeniesienie ładunku oraz powstają krótko żyjące kompleksy. Oddziaływania jonów z molekułami prowadzi do migracji wodoru i powstawania wzbudzonych rodników NH, które mogą być selektywnie tworzone przez energię kationów.

Układy molekularne które opisuje zajmuje się dr Tomasz Wąsowicz są analogami cząsteczek o znaczeniu biologicznym, takich jak cukry czy zasady nukleinowe. Prowadzone przez niego badania mają znaczenie w kontekście oddziaływania promieniowania z DNA i innymi układami biologicznymi. Jest to ważne w terapiach nowotworowych oraz w działaniu promieniowania na organizm w przestrzeni kosmicznej np. w czasie misji kosmicznych, gdzie występują cząstki zjonizowane o wysokiej energii.

3. Ocena dorobku naukowego dr Tomasza Wąsowicza nie będącego przedmiotem rozprawy habilitacyjnej

Dorobek publikacyjny dr Tomasza Wąsowicza obejmuje 35 pozycji z czego 24 należą do bazy Journal Citation Reports (JCR).

Dorobek przed uzyskaniem stopnia doktora.

Habilitant opublikował osiem prac dotyczących pomiarów struktury nadsubtelnej i izotopowej atomu i jonu ołowiu. Pomiary pozwoliły określić przesunięcia izotopowe które dały informacje o strukturze elektronowej i jądrowej atomu i jonu ołowiu. Autor używał

metod półempirycznych do teoretycznej weryfikacji danych doświadczalnych. Wyznaczone teoretycznie prawdopodobieństwa przejść zgadzały się z doświadczeniem w przypadku silnych linii rezonansowych. Badania te zaowocowały rozprawą doktorską na Wydziale Matematyki, Fizyki i Informatyki Uniwersytetu Gdańskiego, której promotorem był prof. Jerzy Kwela.

Dorobek po uzyskaniu stopnia doktora

Po doktoracie dr Tomasz Wąsowicz kontynuował tematykę związaną z pracą doktorską. Podjął też badania efektu Starka w atomach helu umieszczonych w bardzo silnych polach elektrycznych we współpracy z prof. Laurentiusem Windholzem z Uniwersytetu Technicznego w Grazu. Po podjęciu zatrudnienia w Politechnice Gdańskiej dr Tomasz Wąsowicz dołączył do zespołu prof. Mariusza Zubka gdzie zajmował się dysocjacją i fragmentacją cząsteczek heterocyklicznych, pomiarem przekrojów czynnych i identyfikowaniem produktów rozpadu. W wyniku nawiązania współpracy z Laboratorium Promieniowania Synchrotronowego Elettra w Trieście Habilitant poszerzył swe badania na wpływ promieniowania synchrotronowego na cząsteczki heterocykliczne.

We współpracy z dr hab. Bogusławem Pranszke z Uniwersytetu Gdańskiego dr Tomasz Wąsowicz badał rozpad cząsteczek organicznych pod wpływem zderzeń z jonami. Współpracuje również z grupą teoretyków pod kierownictwem dr inż. Marty Łabudy. Dr Tomasz Wąsowicz skonstruował na Politechnice Gdańskiej detektor do koincydencji fotonów. Stanowi to część nowych badań dotyczących dynamiki rozpadu cząsteczek heterocyklicznych. Dr Tomasz Wąsowicz planuje eksperymenty we współpracy zagranicznymi grupami doświadczalnymi.

Habilitant odbył siedem staży w zagranicznych ośrodkach naukowych takich jak: The Circular Polarization Beamline, Synchrotron Elettra w Trieście, Włochy; The Gas Phase Photoemission Beamline, Synchrotron Elettra, Triest, Włochy; Institute of Experimental Physics, Graz University of Technology, Austria.

Dr Tomasz Wąsowicz jest członkiem pięciu krajowych i zagranicznych Towarzystw Naukowych. Uczestniczył w dziesięciu krajowych i międzynarodowych projektach badawczych, z tego w czterech jako kierownik. Wykonał 50 recenzji dla czasopism naukowych. Liczba cytowań jego prac wynosi 138, Indeks Hirscha 8, a sumaryczny IF jego publikacji wynosi 39,65.

4. Działalność dydaktyczna i popularyzatorska i organizacyjna

Habilitant prowadzi wykład, ćwiczenia i repetytorium z fizyki dla studentów Wydziału Mechanicznego. Prowadził zajęcia z pracowni fizycznej dla studentów Wydziału Chemicznego i Mechanicznego. Prowadził wykłady fakultatywne i seminarium z astrofizyki współczesnej. Prowadził zajęcia na Podyplomowym Studium Fizyki dla Nauczycieli. Był opiekunem czterech prac dyplomowych inżynierskich i jednej pracy magisterskiej.

Dr Tomasz Wąsowicz wygłaszał wykłady popularnonaukowe dla uczniów szkół gimnazjalnych i liceów. Organizuje Sobotnie Otwarte Wykłady PTF Politechniki Gdańskiej.

Habilitant był współorganizatorem siedmiu konferencji naukowych. Jest współredaktorem dwóch tomów z artykułami pokonferencyjnymi oraz jednej książki ze streszczeniami. Jest członkiem komitetu organizacyjnego XII Krajowego Sympozjum Synchrotronowego które odbędzie się we wrześniu br.

Dr Tomasz Wąsowicz działa w zespole ds. promocji Wydziału Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechniki Gdańskiej, jest elektorem w Uczelnianym Kolegium Elektorów i w Wydziałowym Kolegium Elektorów. Pełni też role przedstawiciela Dziekana WFTiMS ds. praktyk. Był członkiem Zespołu ds. Opracowania Systemu Identyfikacji Wizualnej politechniki Gdańskiej, oraz reprezentantem pracowników nie będących

nauczycielami akademickimi w Radzie Wydziału Matematyki, Fizyki i Informatyki Uniwersytetu Gdańskiego.

5. Wnioski końcowe

Cykl ośmiu publikacji wchodzących w skład rozprawy habilitacyjnej dr Tomasza Wąsowicza stanowi zwartą całość, którą łączy tematyka i metody badawcze. Udział Habilitanta w tych pracach jest dominujący. Ich celem jest poznanie efektów oddziaływania promieniowania VUV oraz jonów atomowych z cząsteczkami heterocyklicznymi co przekłada się na układy biologiczne, a w konsekwencji ma znaczenie w medycynie i astrofizyce. Autor udowadnia, że jest wysokiej klasy specjalistą zarówno w od strony eksperymentalnej jak i w interpretacji wyników doświadczalnych. W celu lepszego zrozumienia działających mechanizmów zwraca się również do metod teoretycznych. Otrzymane w rozprawie wyniki stanowią twórczy i oryginalny wkład w naukę światową.

Dr Tomasz Wąsowicz wykazuje także dużą aktywność naukową w pracach które nie należą do jego rozprawy habilitacyjnej. Publikacje Habilitanta powstały we współpracy międzynarodowej. Ma on na swoim koncie liczne wyjazdy do ośrodków zagranicznych i ze współpracą międzynarodową wiąże swoje przyszłe plany naukowe. Do jego osiągnięć należy także skonstruowanie aparatury badawczej, detektora koincydencji fotonów. Publikacje dr Tomasza Wąsowicza i jego działalność badawcza udowadniają iż umie on prowadzić samodzielne badania naukowe.

Biorąc pod uwagę całość dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego, stwierdzam, iż dr Tomasz Wąsowicz spełnia wymagania wynikające z *Ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki* z dnia 14 marca 2003 wraz z późniejszymi zmianami odnoszące się do prac habilitacyjnych i wnoszę o dopuszczenie dr Tomasza Wąsowicza do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

Katowice, 11.04.2018

Maria Jaworska

Maria Jaworska