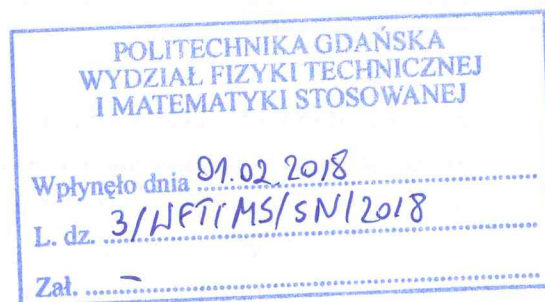


Prof. dr hab. Józef Eugeniusz Sienkiewicz
Katedra Fizyki Teoretycznej i Informatyki Kwantowej
Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej
Politechnika Gdańska



Gdańsk, 31 stycznia 2018 r.

Recenzja rozprawy habilitacyjnej pt. „Dysocjacja cząsteczek heterocyklicznych w absorpcji promieniowania i w zderzeniach z jonami” oraz ocena dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego

dr. Tomasza Jarosława Wąsowicza

ubiegającego się o uzyskanie stopnia naukowego doktora habilitowanego

Informacje wstępne

Dr Wąsowicz studiował na Wydziale Fizyki, Matematyki i Informatyki Uniwersytetu Gdańskiego. Studia ukończył w 2001 roku z tytułem magistra fizyki z informatyką. Następnie specjalizował się w fizyce atomowej i w roku 2006 uzyskał doktorat za rozprawę pt. „Badania struktury linii i prawdopodobieństw przejść w widmie ołowiu” napisanej pod kierunkiem dr. hab. Jerzego Kweli. Po doktoracie pracował w Instytucie Fizyki Doświadczalnej Uniwersytetu Gdańskiego. Od roku 2008 pracuje w Katedrze Zjawisk Elektronowych na Wydziale Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechniki Gdańskiej.

Ocena rozprawy habilitacyjnej

Cykl ośmiu publikacji stanowiący rozprawę habilitacyjną dr. Wąsowicza zawiera badania procesów dysocjacyjnych wybranych związków heterocyklicznych zawierających w swoich pierścieniach oprócz atomów węgla również atomy azotu lub tlenu. Związki te są intensywnie badane ze względu na ich duże znaczenie w chemii organicznej, w medycynie gdzie trzeba znać reakcję biomolekuł na działanie promieniowania elektromagnetycznego i padających strumieni jonowych oraz np. lepszego zrozumienia procesów chemicznych zachodzących w przestrzeni kosmicznej. Prostymi reprezentantami związków heterocyklicznych są, stanowiące przedmiot badań habilitanta, pirydyna z azotem jako heteroatomem, pirymidyna z dwoma heteroatomami azotu, furan i tetrahydrofuran z tlenem oraz dioksan z azotem i tlenem. Przeprowadzone badania można podzielić na dwie grupy w zależności od sposobu wzbudzania stanów elektronowych. Prace od H1 do H5 opisują wyniki badań

przeprowadzonych przy wykorzystaniu promieniowania synchrotronowego, natomiast pozostałe prace opierają się na wykorzystaniu wiązek jonowych. Doświadczenia oparte o pierwsze podejście zostały wykonane na synchrotronie Elettra w Trieście, przy wykorzystaniu techniki spektroskopowej rejestrującej widma emitowane przez wzbudzone fragmenty molekuł. Drugie podejście oparte o wykorzystanie wiązek jonowych zostało wykonane na istniejącym na Uniwersytecie Gdańskim układzie doświadczalnym, gdzie zastosowano technikę emisyjnej spektroskopii zderzeniowej.

Do rozprawy zostały dołączone oświadczenie habilitanta i współautorów prac H1-H8, z których wynika, że habilitant miał zdecydowanie przeważający udział zarówno w wytyczaniu naukowych celów, jak wykonaniu doświadczeń, opracowaniu danych doświadczalnych, ich interpretacji oraz pisaniu tekstów artykułów. Również był pomysłodawcą sposobu wykonania wspomagających obliczeń kwantowo-mechanicznych.

Habilitant otrzymał szereg wartościowych wyników pozwalających na lepsze zrozumienie procesów dysocjacyjnych. M. in. zbadał fotodysocjację molekuł izoksazolu [H2, H3] posługując się promieniowaniem synchrotronowym w zakresach 16-50 eV i 14-22 eV. Wykorzystując pierwszy zakres energetyczny ustalił, że fotofragmentacja na wzbudzone atomy wodoru i molekuły dwuatomowe CH, CN i C₂ głównie prowadzi przez nadwzbudzony stan izoksazolu. Posiłkując się pracami autorów badających analogiczne biomolekuły, stawia tezę o konieczności migracji wodoru lub protonu wzdłuż pierścienia w procesie fragmentacji. Teza ta została udowodniona w następnych pracach z prezentowanego cyklu. Wykorzystanie drugiego przedziału energetycznego fotonów pozwoliło na zbadanie kanału rozpadu zawierającego rodnik NH(A³Π), który nie jest częścią struktury izoksazolu. To potwierdza przemieszczanie się wodoru wzdłuż pierścienia heteroatomowego. Zaplanowane przez habilitanta i wykonane z jego inicjatywy obliczenia za pomocą pakietu GAUSSIAN dały wgląd w proces migracji protonu. Wykonano szereg obliczeń optymalizacyjnych przy ustalonej długości wiązania pomiędzy heteroatomami. Została wyznaczona energia wyrwania rodnika CN, która otwiera pierścień i w konsekwencji prowadzi do pojawienia się rodnika NH wśród produktów dalszego rozpadu.

Wykonane doświadczenia wykorzystujące promieniowanie synchrotronowe i źródła szybkich jonów pozwoliły na zbadanie pewnych procesów dysocjacji pirydyny [H4, H5 i H8]. W zakresie energii padających fotonów od 17,7 do 30 eV, fotodysocjacja przebiega poprzez wzbudzenie do stanu nadwzbudzonego, z którego prowadzą dwie podstawowe ścieżki rozpadu. Pierwsza polega na bezpośredniej eliminacji wzbudzonych atomów wodoru, natomiast druga na migracji protonu od któregoś z wiązań CH do atomu azotu i oddzielenie się rodnika NH w stanie wzbudzonym A³Π. W celu prześledzenia możliwych ścieżek fotodysocjacji, dr Wąsowicz zaplanował obliczenia przy użyciu programu GAUSSIAN. Otrzymane wyniki pozwoliły na ustalenie najmniej stabilnego tautomeru, który w największym stopniu przyczynia się do uwolnienia rodnika NH. Z kolei badania w zakresie energii 16-27 i 14,7-25 eV, poszerzone o pirymidynę, pozwoliły na wykrycie wśród produktów rozpadu wzbudzonych rodników CN(B²Σ⁺). Znowu okazało się, że dominujący proces rozpadu, zarówno pirydyny jak i pirymidyny prowadzi przez stan nadwzbudzony, gdzie następujące po sobie przerwanie pierścienia i izomeryzacja prowadzą do bezpośredniego

uwolnienia rodnika CN. Zaobserwowano też proces pośredni, gdzie uwolniony fragment HCN rozpada się na atom wodoru i rodnik CN. Uzupełniające doświadczenie, w którym wykorzystano zderzenia jonów wodoru, helu i tlenu z cząsteczkami pirydyny w szerokim zakresie energii od 5 do 2000 eV, również pozwoliło na identyfikację, wśród produktów rozpadu wzbudzonego rodnika NH ($A^3\Pi$), przy czym zauważono różnice w przebiegu procesów zderzeniowych zależne od użytych pocisków.

W badaniach fotofragmentacji tetrahydrofuranu [H1] w zakresie energetycznym 14-68 eV, wśród produktów rozpadu zaobserwowano prócz wzbudzonych atomów wodoru, rodniki CH w stanach wzbudzonych $A^2\Delta$ i $B^2\Sigma^-$ oraz molekuly C_2 w stanie $d^3\Pi_g$. Dokładna analiza wydajności produkcji CH i H w funkcji energii fotonów, wykazała możliwość rozpadu tetrahydrofuranu poprzez stan nadwzbudzony. W badaniach zderzeniowych, przy użyciu protonów i jonów węgla oraz tlenu [H6], wśród produktów rozpadu zaobserwowano, wzbudzone atomy wodoru i węgla oraz rodnika CH w stanach $A^2\Delta$ i $B^2\Sigma^-$. Wyższa wydajność atomów węgla i wodoru otrzymana w zderzeniach z protonami i jonami węgla, w odróżnieniu od zderzeń z atomami tlenu, pozwoliła na wyciągnięcie wniosku co do możliwości wychwytu elektronów z tetrahydrofuranu i tworzenia przejściowych kompleksów poprzedzających proces rozpadu.

W doświadczeniach badających dysocjację furanu, przy użyciu wiązek protonów o energii z zakresu 50-1000 eV [H7], również wśród produktów rozpadu zanotowano atomy wodoru i rodniki CH znajdujące się w tych samych stanach wzbudzonych co przy fotonowym wzbudzaniu tetrahydrofuranu. Przy czym nagły wzrost produkcji wzbudzonych atomów wodoru dla $n=4$ został przypisany wychwytowi elektronów z tetrahydrofuranu przez protony z wiązki.

Ocena pozostałego dorobku naukowego

Lista publikacji niewchodzących w skład rozprawy habilitacyjnej obejmuje 16 artykułów i 11 opublikowanych komunikatów konferencyjnych. Artykuły zostały opublikowane w renomowanych czasopismach naukowych. Opublikowane w latach 2005-2012 w liczbie 12 zajmują się fizyką atomową, głównie badaniem widm ołowiu i helu, m.in. dotyczą przesunięcia izotopowego, rozczepienia starkowskiego, struktury nadsubtelnej i efektów interferencyjnych. Część z tych prac powstała dzięki stażowi naukowemu odbytemu na Uniwersytecie Technicznym w Grazu w grupie znanego atomisty prof. L. Windholza. Pozostałe pięć prac, to wynik pracy w zespole prof. M. Zubka. Dotyczą one różnych procesów fragmentacji wybranych związków i stanowią uzupełnienie tematyki badawczej stanowiącej główny nurt rozprawy habilitacyjnej.

Ocena dorobku dydaktycznego

Dr Wąsowicz jest cenionym dydaktykiem. Oprócz zajęć dydaktycznych w postaci wykładów, laboratoriów fizycznych i ćwiczeń rachunkowych prowadzi cenną działalność popularyzatorską wśród uczniów szkół gimnazjalnych i licealnych.

Ocena dorobku organizacyjnego

Habilitant jest aktywny na polu organizacyjnym. Był współorganizatorem siedmiu konferencji naukowych i współredaktorem trzech opracowań materiałów pokonferencyjnych. Bierze czynny udział w pracach organizacyjnych na uczelni i w Polskim Towarzystwie Fizycznym.

Wniosek końcowy

Dr Wąsowicz wykazał się bardzo dobrym opanowaniem dwóch różnych technik doświadczalnych. Opanował technikę spektroskopową polegającą na obserwacji fluorescencji indukowanej promieniowaniem synchrotronowym i analizie otrzymanych widm w celu identyfikacji wzbudzonych fragmentów zdysocjowanych molekuł i otrzymania ich funkcji wzbudzenia przedstawiającej przekrój czynny na wzbudzenia danego fragmentu do określonego stanu elektronowego, oscylacyjnego i rotacyjnego. Wykazał się sprawną budową stanowiska pomiarowego i przeprowadzaniem pomiarów w ściśle określonym reżimie czasowym uwarunkowanym dostępem do źródła promieniowania. Wykonał również serię doświadczeń wykorzystujących technikę emisyjnej spektroskopii zderzeniowej, gdzie wiązka jonowa prowadzi do dysocjacji wybranych tarcz molekularnych. Wykorzystał większą energię jonów w stosunku do promieniowania synchrotronowego do zbadania dodatkowych kanałów dysocjacyjnych.

Dużym osiągnięciem habilitanta jest wykazanie, że na początkowym etapie dysocjacji, cząsteczki heterocykliczne znajdują się w stanach nadwzbudzonych, a następnie poprzez proces izomeryzacji i migracji wodoru wzdłuż pierścienia następuje ich ostateczny rozpad. Wykazał on, że poprzez przestrajanie energii fotonów można generować żądane produkty rozpadu, a nawet wpływać na ich stany energetyczne. Wykazał również, że za pomocą odpowiednio dobranych wiązek jonowych i sterowaniu ich energią można kontrolować procesy zdarzeniowe, prowadząc do powstania różnych fragmentów tarczy molekularnej. Otrzymane wyniki swoim znaczeniem również obejmują, poprzez zastosowanie analogii, możliwe procesy rozpadu ważnych biomolekuł o strukturze pierścieniowej lub łańcuchowej.

Uważam, że dr Tomasz Jarosław Wąsowicz jest dojrzałym badaczem, spełniającym kryteria samodzielności. Uważam, że jego rozprawa habilitacyjna spełnia formalne i zwyczajowe wymogi i wnoszę o dopuszczenie dr. Wąsowicza do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.