



RP/1/3182/2022 N
Data: 2022-02-07



Uniwersytet Rzeszowski
Instytut Nauk Fizycznych
Katedra Badań Materiałowych i Spektroskopowych

Dr hab. Rafał Hakalla, prof. UR

Rzeszów, dnia 27.01.2022

RECENZJA

dorobku naukowego Pani dr Iwony Gulaczyk

ze szczególnym uwzględnieniem osiągnięcia, stanowiącego podstawę postępowania habilitacyjnego, pt. *„Efektywne Hamiltoniany wibracyjno-rotacyjne uwzględniające sprzężenia inwersyjno – torsyjne dla cząsteczek wykonujących drgania o dużej amplitudzie oraz ich wykorzystanie w analizie silnie zaburzonych widm o wysokiej rozdzielczości w podczerwieni”*

1. Przebieg kariery zawodowej

Pani dr Iwona Gulaczyk ukończyła 5-letnie studia magisterskie na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, gdzie w 1994 roku uzyskała tytuł zawodowy magistra chemii broniąc pracę pt. *„Badanie zanieczyszczeń powietrza metodą spektroskopii w podczerwieni o wysokiej rozdzielczości”* pod kierunkiem prof. dra hab. Marka Kręglewskiego. W tym samym roku podjęła studia doktoranckie na macierzystym Wydziale. Stopień doktora nauk chemicznych otrzymała w roku 2000 w uznaniu dysertacji pt. *„Analiza widma rotacyjno-wibracyjnego hydrazyny i etylenu”*. Promotorem pracy był również prof. dr hab. Marek Kręglewski. W 1999 roku ukończyła dodatkowo studia podyplomowe z zakresu sieci komputerowych na Wydziale Elektrycznym Politechniki Poznańskiej.

Pani dr Iwona Gulaczyk jest pracownikiem Wydział Chemii, Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Pierwsze jej zatrudnienie miało miejsce w okresie 1.01-30.09.1994 r. na stanowisku inżynierjno-technicznym. W latach 2000-2002 pracowała na stanowisku wykładowcy, do roku 2014 w charakterze adiunkta, a następnie jako starszy wykładowca aż do chwili obecnej. W latach 1996-1997 pracowała także jako nauczyciel informatyki w Społecznej Szkole Podstawowej nr 1 w Poznaniu.

ul. prof. Stanisława Pigionia 1, 35-310 Rzeszów
tel.: +48 17 851 87 03
e-mail: rhakalla@ur.edu.pl

2. Ocena osiągnięcia naukowego

Prowadzone przez Panią dr Iwonę Gulaczyk badania naukowe na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu wpisują się w zakres chemii teoretycznej i kwantowej. Głównym przedmiotem jej badań jest spektroskopia molekularna wysokiej rozdzielczości w zakresie widm rotacyjnych i oscylacyjno-rotacyjnych małych cząsteczek wykonujących drgania o dużej amplitudzie. Są to prace polegające zarówno na wyprowadzeniu Hamiltonianów efektywnych i pisaniu programów obliczeniowych, jak i na analizie widm IR o wysokiej rozdzielczości zawierających od kilkunastu do kilkudziesięciu tysięcy linii spektralnych. Efektem tych prac jest interpretacja tych linii, czyli przypisanie ich do przejść promienistych pomiędzy poziomami rowibracyjnymi w cząsteczce.

Przedstawione przez Panią dr Iwonę Gulaczyk osiągnięcie naukowe pt.: *„Efektywne Hamiltoniany wibracyjno-rotacyjne uwzględniające sprzężenia inwersyjno-torsyjne dla cząsteczek wykonujących drgania o dużej amplitudzie oraz ich wykorzystanie w analizie silnie zaburzonych widm o wysokiej rozdzielczości w podczerwieni”*, stanowiące podstawę do ubiegania się o stopień doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne, opiera się o jednotematyczny cykl ośmiu oryginalnych prac wieloautorskich [H1-H8], opublikowanych po uzyskaniu stopnia doktora w renomowanych czasopismach z listy JCR o zasięgu globalnym: *Journal of Molecular Spectroscopy* (5 prac), *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* (2 prace), *Molecular Physics* (1 praca). W każdej z tych publikacji Habilitantka jest pierwszym autorem, przy czym w pracach [H6-H8] jest także autorem korespondencyjnym. We wszystkich publikacjach [H1-H8] Pani dr Iwona Gulaczyk odgrywa zdecydowanie wiodącą rolę, z udziałem szacowanym na poziomie 70-90%, co jednoznacznie wynika z przedłożonej dokumentacji wraz z oświadczeniami współautorów.

Przedmiot badań przedstawiony w osiągnięciu habilitacyjnym Pani dr Iwony Gulaczyk dotyczy analizy widm IR o wysokiej rozdzielczości niesztywnych cząsteczek hydrazyny, N_2H_4 , prace [H1-H2] i metyloaminy, CH_3NH_2 , prace [H3-H8], przy jednoczesnym rozwijaniu modeli matematycznych służących do interpretacji tych widm. Spektroskopia rotacyjna i oscylacyjno-rotacyjna cząsteczek w fazie gazowej, gdyż z taką mamy tutaj do czynienia, ma zasadnicze znaczenie dla określenia geometrii cząsteczki w jej różnych stanach wibracyjnych, wyznaczenia kształtu wielowymiarowej powierzchni potencjalnej dla oscylacji, oraz wielkości momentu dipolowego. Wyznaczenie przestrzennej budowy cząsteczki i określenie kształtu jej wielowymiarowej powierzchni potencjalnej jest ekstremalnie trudne w przypadku cząsteczek wykonujących drgania o dużej amplitudzie, ponieważ powierzchnia potencjalna takich molekuł posiada kilka minimów o zbliżonej energii i stosunkowo niskich barierach energetycznych lub jedno rozległe minimum. Określenie geometrii takich cząsteczek stanowi nie lada wyzwanie, gdyż przechodzą one z jednej konfiguracji równowagowej w inną. Hydrazyna wykonuje aż trzy drgania o dużej amplitudzie: dwie inwersje grup aminowych $-NH_2$, oraz wewnętrzną rotację (torsję) wokół wiązania N-N. Metyloamina natomiast jest przykładem molekuły wykonującej dwa drgania o dużej amplitudzie: inwersję grupy aminowej $-NH_2$ i torsję grupy metylowej $-CH_3$ wokół wiązania C-N. Z powodu występowania w tych cząsteczkach więcej niż jednej konfiguracji równowagowej, każdy rowibracyjny poziom energetyczny jest rozszczepiony na kilka podpoziomów. Odpowiednia interpretacja widm polega na wykazaniu, między jakimi stanami cząsteczki następuje przejście promieniste, co jest bardzo trudnym zadaniem. Znalezienie odpowiedniego sposobu opisu cząsteczek wykonujących drgania o dużej amplitudzie wymaga więc najczęściej indywidualnego podejścia teoretycznego.

Pomimo, iż analiza widm o wysokiej rozdzielczości hydrazyny, N_2H_4 , i metyloaminy, CH_3NH_2 , została już kilkakrotnie przeprowadzona przez różne grupy badawcze, jawnie wymienione w literaturze ocenianego osiągnięcia, to prezentowane przez Habilitantkę podejście do tego tematu jest zdecydowanie nowatorskie. Do najważniejszych bowiem osiągnięć dr Iwony Gulaczyk dokonanych w badaniach nad cząsteczką hydrazyny zaliczyć należy:

- analizę pasma inwersyjnego symetrycznego (ν_6) w rejonie MIR (729 - 1198 cm^{-1}) z uwzględnieniem silnego rezonansu typu Fermiego;
- identyfikację stanu globalnie zaburzającego symetryczny stan inwersyjny, który został zinterpretowany jako trzeci wzbudzony stan torsyjny ($3\nu_7$) oraz interpretację przejść rowibracyjnych należących do tego stanu;
- przedstawienie nowej metody do opisu wszystkich transformacji lokalnych funkcji rowibracyjnych w konfiguracjach równowagowych pod wpływem operacji symetrii podwójnej grupy $G_{16}^{(2)}$ dla stanów torsyjno-inwersyjnych symetrycznych i antysymetrycznych względem operacji C_2 grupy punktowej;
- wyprowadzenie elementów macierzowych Hamiltonianu efektywnego uwzględniającego sprzężenia inwersyjno-torsyjne, których rezultaty jednoznacznie określiły możliwy typ zaburzeń (Fermiego i Coriolisa) między stanem inwersyjnym symetrycznym, a perturbentami.

Z kolei, do najważniejszych osiągnięć Habilitantki w badaniach nad cząsteczką metyloaminy należy:

- uzupełnienie analizy w obrębie silnie zaburzonego pasma inwersyjnego (ν_9) w rejonie MIR (640 - 960 cm^{-1}). Zidentyfikowano bowiem brakujące linie dla wszystkich symetrii, nawet te o niskiej intensywności (symetria A, E_{2+1} , E_{2-1}), a przypisane serie są o wiele dłuższe (nawet do $J' = 40$) i dla wyższych wartości K' niż znane do tej pory;
- identyfikacja stanów zaburzających stan inwersyjny, a przede wszystkim stanu torsyjnego $4\nu_{15}$ odpowiedzialnego za silne globalne zaburzenia (sprzężenie typu Fermiego);
- rozszerzenie Hamiltonianu efektywnego Hougena i Ohashiego w celu uwzględnienia oddziaływań między stanem inwersyjnym ν_9 , oraz trzecim i czwartym wzbudzonym stanem torsyjnym, $3\nu_{15}$ i $4\nu_{15}$. Elementy macierzowe zostały wyprowadzone dla oddziaływań między stanem inwersyjnym a trzecim i czwartym wzbudzonego stanem torsyjnym;
- przeprowadzenie po raz pierwszy pełnej analizy (interpretacja przejść rowibracyjnych dla wszystkich symetrii i dopasowanie obserwowanych przejść do modelu Hamiltonianu efektywnego) pasma C-N rozciągającego (ν_8) w rejonie MIR (960 - 1200 cm^{-1}). Dokonano identyfikacji stanu globalnie zaburzającego stan C-N rozciągający - wzbudzony czwarty stan torsyjny ($4\nu_{15}$) oraz stany mogące oddziaływać w formie sprzężenia Coriolisa - trzeci wzbudzony stan torsyjny ($3\nu_{15}$) i/lub stan kombinacyjny ($\nu_9 + \nu_{15}$);
- pierwsza pełna i dokładna analiza pierwszego stanu torsyjnego (ν_{15}) w widmie o wysokiej rozdzielczości w rejonie FIR (40 - 360 cm^{-1});
- pierwsza kompletna analiza drugiego wzbudzonego stanu torsyjnego ($2\nu_{15}$) w widmie FIR/MIR (40 - 720 cm^{-1}). W analizie tej uwzględniono także dużą liczbę przejść rowibracyjnych należących do pasma gorącego $\nu_{15}=2\leftarrow 1$;
- analiza przejść czysto rotacyjnych w widmie FIR (40 - 360 cm^{-1}) należących do stanu podstawowego i dwóch wzbudzonych stanów torsyjnych ($\nu_{15}=0\leftarrow 0$, $\nu_{15}=1\leftarrow 1$ and $\nu_{15}=2\leftarrow 2$).

W mojej ocenie, przywołane powyżej dokonania Pani dr Iwony Gulaczyk w dziedzinie spektroskopii wysokich rozdzielczości oraz modelowania struktury energetycznej cząsteczek hydrazyny i metyloaminy, wykonujących drgania o dużej amplitudzie, będące przedmiotem prac [H1 - H8], stanowią istotny i znaczący wkład w rozwój dyscypliny nauki chemicznej.

3. Ocena aktywności naukowej

Na dorobek publikacyjny Pani dr Iwony Gulaczyk składają się 23 prace. Osiem z nich [H1-H8] stanowi omówione powyżej osiągnięcie naukowe będące podstawą rozprawy habilitacyjnej. Kolejne dziewięć prac [B1-B9] ukazało się, podobnie jak [H1-H8], w renomowanych czasopismach znajdujących się na liście JCR, takich jak: *Coordination Chemistry Reviews* (IF=22.315, MEiN 200), *Journal of Molecular Structure*, *Journal of Molecular Spectroscopy*, *Chemical Physics Letters*, *Canadian Journal of Physics*, *Journal of Catalysis*. Jedna z tych prac [B9] jest pracą przeglądową. Następne sześć prac [B10-B15] opublikowano w czasopismach spoza listy JCR, w postaci wydań pokonferencyjnych, popularnonaukowych i przeglądowych. W szesnastu pracach Habilitantka jest pierwszym autorem, a w ośmiu także autorem korespondencyjnym. Spośród wszystkich opublikowanych przez Habilitantkę prac, dwie [B1-B2] ukazały się przed uzyskaniem stopnia doktora, a pozostałe dwadzieścia jeden [H1-H8; B3-B15] po tym fakcie.

H-indeks Pani dr Iwony Gulaczyk (wg Web of Science/Scopus z dn. 27.01.2022) wynosi 7/7, podczas gdy sumaryczna liczba cytowań 99/153 lub 77/115 bez autocytowań. Są to dość typowe wartości naukowometryczne na tym etapie kariery zawodowej w przypadku uznanych dokonań w obszarze bardzo wymagającej i wąskiej specjalności, jaką jest modelowanie skomplikowanych struktur molekularnych zaburzanych przez mocno zróżnicowane oddziaływania wewnątrzcząsteczkowe dające mierzalne efekty często w tych samych rejonach badanego widma. Bardzo dobrym wskaźnikiem w tego typu przypadkach jest dynamika rocznego przyrostu liczby cytowań, która to liczba wahała się w granicach 1 - 6 do 2014 r., aby w 2021 r. osiągnąć wartość 16. Sumaryczny IF wszystkich publikacji Habilitantki wynosi 56,991, natomiast jego średnia wartość przypadająca na jedną publikację to 3,352, co jest zdecydowanie bardzo dobrym wynikiem. Suma punktów według listy MEiN dla wszystkich publikacji wynosi 1420, a średnia liczba punktów za publikację to 83,529.

Poza opisanymi pracami, Pani dr Iwona Gulaczyk jest autorką rozdziału w monografii [A1] pt. *“Chemical Synergies – From the Lab to In Silico Modelling”*. Habilitantka wystąpiła także w roli współedytora monografii pt. *“Theoretical and Computational Chemistry”*, w której jest jednocześnie współautorem dwóch rozdziałów [A2, A3]. Monografie te ukazały się w latach 2018 i 2021.

Wyniki powyżej opisanych prac Pani dr Iwony Gulaczyk zaprezentowane zostały 27 razy (25 razy po doktoracie) na międzynarodowych konferencjach tematycznych, organizowanych zarówno w Polsce jak i za granicą. W ramach tych wydarzeń Habilitantka aż 10 razy wystąpiła z komunikatem ustnym, przy czym 2 razy był to wykład zaproszony, co uważam za bardzo znaczącą aktywność na polu popularyzacji swoich dokonań naukowych.

Habilitantka jest członkiem komitetu redakcyjnego wydawnictwa *Cambridge Scholars Publishing (Newcastle Upon Tyne, GB)* oraz czasopisma *Physical Sciences Reviews*. Była ona także recenzentem dwóch publikacji, z których jedna ukazała się w renomowanym czasopiśmie z listy JCR - *Pure and Applied Chemistry* (IF₂₀₂₀=2,453).

Swoją współpracę z zagranicznymi grupami badawczymi Habilitantka rozpoczęła już na czwartym roku studiów magisterskich, podczas pobytu na University of Reading (Wielka Brytania) w latach 1993 - 1994. Po uzyskaniu magisterium, Pani dr Iwona Gulaczyk odbyła dwa staże naukowe (w sumie trwające około cztery miesiące) na Université Catholique de Louvain-la-Neuve (Belgia) w latach 1995-1996. Po uzyskaniu stopnia doktora wzięła udział w trzech tygodniowych wyjazdach na Universitat Rovira i Virgili (Tarragona, Hiszpania) (2 razy) oraz Université Paris-Est Créteil, UPEC, Francja (1 raz). Przyglądając się karierze zawodowej Pani dr Iwony Gulaczyk, nie sposób nie zauważyć,

iż po uzyskaniu stopnia doktora zabrakło w niej dłuższego stażu naukowego. Jednakże, pomimo tego braku, Habilitantce udało się nawiązać ponadprzeciętnie szeroką i efektywną współpracę zagraniczną. Znaczną bowiem część swoich dokonań naukowych, a więc publikacje [H4-H7, B1-B3, B6-B7, B9, B12, B15] i rozdział monografii [A2], osiągnęła we współpracy z jedenastoma zagranicznymi grupami badawczymi z takich ośrodków jak m.in. Sorbonne Universite (CNRS, MONARIS, Francja), Université de Paris (Francja), Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques (LISA, Francja), Université Paris-Est Créteil (UPEC, Francja), Oulun yliopisto (Uniwersytet w Oulu, Finlandia), Université Catholique de Louvain-la-Neuve (Belgia) oraz Radboud Universiteit Nijmegen (Holandia).

Pani dr Iwona Gulaczyk potrafiła skutecznie pozyskiwać fundusze na realizację zamierzonych celów naukowych oraz włączać się w szereg interesujących projektów badawczych. W latach 1994 - 2013 była wykonawcą pięciu projektów, w tym dwóch zagranicznych i jednego MNiSW. W roku 2013 została kierownikiem grantu obliczeniowego „PL-Grid Infrastructure”. Realizacja ostatnich dwóch projektów miała miejsce po uzyskaniu stopnia doktora. W 2017 roku współaplikowała o grant *Marii Skłodowskiej-Curie „Innovation Training Network”*. Projekt został bardzo dobrze oceniony przez niezależnych międzynarodowych ekspertów, jednakże z powodu ograniczonego budżetu nie uzyskał finansowania.

Pani dr Iwona Gulaczyk była promotorem pomocniczym pracy doktorskiej w swojej macierzystej uczelni w latach 2015-2018 oraz sprawowała opiekę naukową nad doktorantką Universitat Rovira i Virgili w trakcie swojego pobytu w Tarragonie (Hiszpania) w okresie 15.07-16.09.2019.

Dalsza kariera naukowa Habilitantki jest konkretnie sprecyzowana, co jest dobrym prognostykiem dla jej ewentualnych, przyszłych doktorantów. Plany badawcze dotyczące analizy cyjanosilanu, SiH₃CN, 5-metylotropolonu, nitrometanu, CH₃NO₂, freonu, ¹³CHClF₂, oraz wodorku manganu, MnH, sięgają poza jej dotychczasowy obszar zainteresowań, co świadczy o dążeniu do wszechstronnego rozwoju w dziedzinie, w której już teraz jest wysokiej klasy specjalistką.

Wobec powyższych faktów, stwierdzam, że Pani dr Iwona Gulaczyk wykazuje się istotną aktywnością naukową realizowaną w więcej niż jednej instytucji naukowej, w tym wielu zagranicznych. Efektywność naukową Habilitantki i jej zaangażowanie w osiągnięcie celów badawczych oceniam bardzo wysoko.

4. Ocena dorobku dydaktycznego i organizacyjnego

Pani dr Iwona Gulaczyk posiada znaczące osiągnięcia dydaktyczne, popularyzatorskie, a także organizacyjne. Do osiągnięć dydaktycznych należy zaliczyć przede wszystkim opracowanie programów do wielu wykładów, ćwiczeń audytoryjnych i laboratoryjnych oraz prowadzenie tych zajęć dla studentów zarówno polskich jak i anglojęzycznych. Habilitantka prowadziła także szkolenia dla kadry akademickiej w zakresie baz danych i profesjonalnego oprogramowania wykorzystywanego w pracy dydaktycznej. W ramach popularyzacji nauki, wygłosiła wiele prelekcji, wykładów oraz zajęć, które nie były bezpośrednio związane z jej obowiązkowym pensum dydaktycznym. Za swoją działalność dydaktyczną otrzymała nagrodę władz dziekańskich Wydziału Chemii UAM w 2017 roku.

Habilitantka posiada również bardzo znaczący dorobek organizacyjny. Jest ona obecnie wydziałowym koordynatorem programu *Erasmus+* (od kwietnia 2014), koordynatorem kierunku *Chemistry* na Wydziale Chemii UAM (od roku 2017) oraz członkiem komisji eksperckich projektów

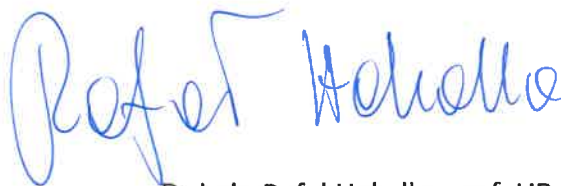
HigChem (od roku 2019), *INNChem* (od roku 2018) oraz *ChemInter* (od roku 2018). Programy te służą m.in. poprawie jakości studiów doktoranckich UAM w dyscyplinie nauki chemiczne. Pani dr Iwona Gulaczyk była również koordynatorem i głównym wykonawcą projektu NCBiR „*Chemistry-przyszłość międzynarodowego rozwoju polskiej branży chemicznej*” (lata 2016 – 2021), członkiem zespołu ds. Oceny Jakości Kształcenia Wydziałowej Komisji do Spraw Jakości Kształcenia (2 kadencje, od 2010 do 2016 r.) oraz członkiem zespołu ds. Zapewnienia Jakości Kształcenia na Wydziale Chemii UAM (lata 2016 - 2019). Jest także członkiem Polskiego Towarzystwa Chemicznego. Za swoją działalność organizacyjną otrzymała nagrodę Rektora UAM w 2019 r.

Habilitantka wzięła udział w wielu kursach i szkoleniach podnoszących jej kompetencje informatyczne, dydaktyczne oraz lingwistyczne w zakresie aż czterech języków (angielski, hiszpański, niemiecki oraz francuski). Posiada certyfikat *C1 Advanced (CAE)* z języka angielskiego. Wszystko to świadczy o szerokich zainteresowaniach i determinacji do samodoskonalenia, zarówno naukowego jak i dydaktycznego.

Uważam, że dorobek dydaktyczny, popularyzatorski i organizacyjny Pani dr Iwony Gulaczyk jest zdecydowanie ponadprzeciętny.

5. Rekomendacja

Na podstawie pozytywnej oceny przedstawionego dorobku naukowego ze szczególnym uwzględnieniem osiągnięcia stanowiącego podstawę postępowania habilitacyjnego oraz istotnej aktywności naukowej realizowanej w więcej niż jednej instytucji naukowej, w tym wielu zagranicznych, stwierdzam, że Pani dr Iwona Gulaczyk spełnia wszystkie wymagania określone w art. 219 ust. 1. ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 30 sierpnia 2018 poz. 1668). Całkowity dorobek publikacyjny Habilitantki oraz związana z nim aktywność naukowa są na bardzo dobrym poziomie. Podobnie wysoko oceniam jej aktywność dydaktyczną, popularyzatorską i organizacyjną. **W związku z powyższym rekomenduję Radzie Naukowej Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza nadanie Pani dr Iwonie Gulaczyk stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne.**



Dr hab. Rafał Hakalla, prof. UR