



Prof. dr hab. Joanna Sadlej
Instytut Nauk Chemicznych
Wydział Matematyczno-Przyrodniczy
Uniwersytet Kardynała Stefana Wyszyńskiego w Warszawie
Wóycickiego 1/3, 01-938 Warszawa, Polska
E-mail: j.sadlej@uksw.edu.pl

Warszawa, 15 luty, 2022

RECENZJA

rozprawy habilitacyjnej pani dr Iwony Gulaczyk

pt. "The effective Hamiltonians for the coupling between inversion-torsion states in molecules performing large amplitude vibrations and their applications in analysis of the strongly perturbed high resolution infrared spectra."

oraz ocena dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego Habilitantki

Podstawa prawna opracowanej recenzji: Ustawa z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki oraz rozporządzenie Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 1 września 2011 r. oraz z dnia 26 września 2016 r.

I. Podstawowe dane o Pani Habilitantce

Pani dr Iwona Gulaczyk obecnie pracuje na etacie starszego wykładowcy na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Tytuł doktora nauk chemicznych otrzymała w 2000 r. na podstawie rozprawy pt. „Analysis of rotation-vibrational spectra of hydrazine and ethylene” pod opieką prof. dr hab. Marka Kręglewskiego. W czasie pracy nad tematem doktorskim odbyła parę krótkoterminowych wyjazdów zagranicznych do Belgii, Hiszpania i w ramach programu Erasmus do Francji. W latach następnych współpracowała z wieloma laboratoriami spektroskopii mikrofalowej dużej zdalności rozdzielczej w Belgii, Francji, Finlandii, co znajduje swój ślad w licznych wielo-autorskich publikacjach.

W 2021 r. dr Iwona Gulaczyk przedstawiła dzieło naukowe pt. *"The effective Hamiltonian for the coupling between inversion-torsion states in molecules performing large amplitude vibrations and their applications in analysis of the strongly perturbed high resolution infrared spectra"*, wszczynając postępowanie habilitacyjne.



Dzieło to obejmuje 8 oryginalnych wielo-autorskich prac naukowych, oznaczonych w autoreferacie (Raport) symbolami od H1 do H8, opublikowanych w uznanych czasopismach z tzw. listy filadelfijskiej. Ponadto Habilitantka jest współautorem 6 wielo-autorskich artykułów naukowych opublikowanych w czasopismach z LF, które choć dotyczą tematyki prezentowanej w rozprawie habilitacyjnej nie zostały do niej zamieszczone oraz trzech artykułów przeglądowych (A1-A3) w książce wydanej przez wyd. Walter de Gruyter GmbH, Berlin.

W następujących informacjach zawartych w tej części Raportu dotyczącej pracy naukowej Autorka omówiła wyniki 9 publikacji oznaczonych literą od B1 do B9. W tym zbiorze znalazły się publikacje opisujące widma rotacyjne i struktury innych związków chemicznych, niż te w rozprawie habilitacyjnej, np. SiH_3CN , CH_3NO_2 , CH_2NH_3 , CHF_2Cl . Brała udział w wielu konferencjach międzynarodowych i krajowych, prezentując wyniki swojej pracy. Była kierownikiem i wykonawcą w projektach naukowych: trzech PECO oraz jednego grantu MNiŚW w latach 2010-2013.

Tempo kariery naukowej Habilitantki należy zatem uznać za owocne. Świadczy ono również o aktualności poruszanych przez Habilitantkę problemów badawczych, a równocześnie jest gwarancją, że wyniki jej badań były recenzowane przez światowych specjalistów. Po zapoznaniu się z opisem Autorki o Jej udziale w powstawaniu wchodzących w skład dzieła habilitacyjnego ośmiu oryginalnych publikacji stwierdzam, że *udział intelektualny i wykonawczy Habilitantki w publikacjach składających się na rozprawę habilitacyjną jest wystarczający* i spełnia wymogi formalne stawiane przez Ustawę.

II. Ocena merytoryczna rozprawy habilitacyjnej

Przy pomocy spektroskopii można badać struktury i kształty, szczególnie sztywnych molekuł. Jednakże, większość molekuł jest do pewnego stopnia niesztymna i ta niesztymność odgrywa wielką rolę, np. w aktywności biologicznej, energii przejść elektronowych i chemicznej reaktywności. Dodatkowo, oscylacje o dużej amplitudzie obecne w niesztymnych molekułach prowadzą często do obecności niezwykle niski energetycznych poziomów oscylacyjnych, zmieniając tym samym właściwości termodynamiczne tych układów. Ostatnie lata pokazały, że obraz dynamiki zmian konformacyjnych zachodzących w niesztymnych układach pozwala na zrozumienie i charakterystykę widm tych szczególnych molekuł. Zatem staranne rozważania oscylacyjno – rotacyjno - inwersyjnych sprzężeń, reguł wyboru, a także amplitud oscylacji, pozwalają na poprawę opisu dynamiki molekuł.



Oceniana przeze mnie rozprawa habilitacyjna Pani dr Gulaczyk reprezentuje kolejny etap realizacji badań nad spektroskopowymi aspektami chemii kwantowej w celu zbadania struktury i właściwości fizyko-chemicznych wybranych dwóch molekuł (hydrazyna oraz metyloamina) z grupy związków o mocno specyficznych właściwościach w postaci drgań o dużych amplitudach. Autorka w pełni korzysta z dotychczasowych osiągnięć i doświadczeń zdobytych podczas współpracy z prof. dr hab. Markiem Kręglewskim na macierzystej Uczelni. Ponadto, Habilitantka rozwinęła współpracę z ośrodkami doświadczalnymi spektroskopii rotacyjnej w Europie.

Przedstawione badania własne Habilitantka prowadzi przede wszystkim w kierunku wykorzystania możliwości opisu sprzężenia ruchów rotacyjnych z oscylacjami w badaniu struktury i właściwości widm dwóch molekuł: hydrazyny i metyloaminy.

Bardzo ważnym czynnikiem sprzyjającym rozwojowi tego typu tematyki jest możliwość praktycznego ich wykorzystywania w rozwiązywaniu wielu problemów, np. przeniesienie protonów. Zatem, nie ulega dla mnie wątpliwości, że temat ten jest poprawnie zdefiniowany i dotyczy zagadnień związanych z problemem struktur molekuł, *mieszcząc się w nurcie aktualnych naukowych tematów badawczych.*

Rozprawę (Raport) stanowi zbiór 8 publikacji wielo-autorskich opublikowanych w latach 2007-2020. We wszystkich publikacjach pierwszym autorem jest Pani Habilitantka, Profesor Marek Kręglewski również występuje jako współautor. Wszystkie publikacje są wydrukowane w wiodących czasopismach z tej dziedziny, czyli J. Mol. Spectroscopy, i J. Quantitative Spect. & Radiative Transfer.

Dołączony do zbioru publikacji jest 56-stronicowy Raport. Jasno sformułowany cel rozprawy, logiczny rozwój tematyki i omówienie poszczególnych rezultatów oraz podsumowanie otrzymanych wyników świadczą o naukowej porządności Habilitantki.

Cykl publikacji naukowych przedstawiony w postaci osiągnięcia habilitacyjnego zawiera zagadnienia, które Autorka zgrupowała w jeden główny punkt: Zinterpretować widma w podczerwieni molekuł hydrazyny i metyloaminy w obszarach widma w podczerwieni, w których zaobserwować można silne wpływy drgań o dużych amplitudach. W przypadku hydrazyny jest to zakres 729 do 1198 cm^{-1} odpowiadający drganiom symetrycznej i asymetrycznej inwersji grupy NH_2 oraz wewnętrznej rotacji wokół wiązania N-N. Zaprezentowane widmo w tym zakresie rzeczywiście przedstawia gęszcz sygnałów przypisanych pasmom drgań oscylacyjnych ν_6 i ν_{12} . W przypadku metyloaminy jest to obszar 640 – 960 cm^{-1} . Częściowo, widmo tej molekuly było już



zinterpretowane, jednakże znalezione zostały nowe sygnały o niskich intensywnościach. Ponadto, zaobserwowane zostało pasmo odpowiadające drganiu rozciągającemu $\nu_8(C-N)$.

Aby móc zinterpretować widma obu molekuł w tych trudnych zakresach niezinterpretowanych dotychczas, pierwszym zadaniem Pani Habilitantki było wyprowadzenie hamiltonianu opisującego sprzężone ruchy: małe oscylacje, duże oscylacje oraz rotacje. Taki Hamiltonian został wyprowadzony w ramach grup PI (perturbacyjno-inwersyjnych), korzystając z doświadczalnych danych do procedury fitowania. Wybór współrzędnych do opisu tych trzech ruchów wymagał także starannego doboru. Przyjęta procedura opisana jest ze szczegółami w publikacji, nr. H1. Autorka w tym miejscu podkreśla, iż sprzężenie pomiędzy stanami energetycznymi opisującymi inwersję ze stanami opisującymi ruchy torsyjno-wahadłowe zostało uwzględnione po raz pierwszy w literaturze.

Moim zdaniem, wyniki badań uzyskane przez Habilitantkę w ramach poszerzonego opisu sprzężeń oscylacyjno-rotacyjnych poszerzają dotychczasową wiedzę w dziedzinie spektroskopii molekuł o dużych amplitudach. Dr Gulaczyk wykazała znajomość literatury przedmiotu, umiejętność racjonalnego planowania i realizowania badań, twórczą współpracę z innymi zespołami oraz zdolność do formułowania wniosków. A zrozumienie wyżej omawianych mechanizmów pozwoli najpewniej w przyszłości na zaprojektowanie nowych tematów badawczych. Rozprawę oceniam pozytywnie pod względem jej wartości. Jest to wkład Autorki do badań ważnych z punktu widzenia chemii i spektroskopii nietypowych molekuł.

Kończąc tę część recenzji, dodaję uwagę. W wnioskach końcowych Raportu brakuje, moim zdaniem, dyskusji wad stosowanej przez Autorkę metodologii oraz wskazania możliwości dalszego jej udoskonalenia.

Podsumowując stwierdzam, że dzieło habilitacyjne przedstawione przez Dr Iwonę Gulaczyk w formie cyklu 8 oryginalnych i spójnych tematycznie naukowych publikacji spełnia wymagania stawiane w przepisach związanych z postępowaniem habilitacyjnym.

III. Ocena naukowej działalności Habilitantki

Poza publikacjami, które stanowią rozprawę habilitacyjną pani Habilitantka opublikowała dodatkowe publikacji, we współpracy z naukowcami z zagranicy. Są one zebrane w zbiorze B. Publikacje te dopełniają zbiór wyników zawartych w zbiorze H i prezentują badania struktury oscylacyjno-rotacyjnej związków wykazujących drgania o dużych amplitudach.



Liczne wystąpienia konferencyjne w postaci referatów i posterów poświęcone są tematyce tych związków, ich modelowaniu i badaniom spektroskopowym. Uważam, że wydzielony od rozprawy habilitacyjnej dorobek naukowy w postaci 6 publikacji naukowych i dużej aktywności konferencyjnej jest bardzo poważny.

Podsumowując uważam, że ocena działalności naukowo-badawczej Habilitantki jest ważna, gdyż oceniane prace są publikowane w DOBRYCH czasopiśmie z TEJ dziedziny. Świadczą o tym wartości parametrów cytowalności i „impact factorów czasopism”.

Na zakończenie tej części recenzji zobowiązana jestem do dodania ogólnego komentarza. Porównując statystyczne parametry podane przez Panią Gulaczyk na stronie nr 6 Raportu (jak suma IF, index H, ect) z parametrami tych danych wielu habilitantów w Polsce można odnieść wrażenie bardzo skromnych liczba zaprezentowanych przez Panią Habilitantkę. Jednakże, wobec dyskusji toczących się w Polsce wokół tematu oceny pracy naukowców należy w tym przypadku zaznaczyć dwa punkty, o których trzeba pamiętać: 1) wszystkie publikacje pani Gulaczyk w liczbie 17 publikowane były w czasopiśmie będących wymienionymi w Journal of Citation Reports, czyli mają zakres międzynarodowy oraz, 2) stosunkowo mała liczba cytowań wyników badań pani Habilitantki dobrze koreluje z niewielką liczbą naukowców zajmujących się tak subtelnymi problemami, jak teorią i widmami molekuł o dużych amplitudach drgań. Jednakże w przyszłości sytuacja może ulec zmianie; np. mechanizm tunelowanie protonu w wielu związkach o znaczeniu biologicznym będzie wymagał uwzględnienia subtelnego sprzężenia pomiędzy drganiami a rotacjami.

IV. Ocena działalności dydaktycznej i organizacyjnej

Dr Gulaczyk prowadziła różnorodne zajęcia dydaktycznych w macierzystej Uczelni. Były to: wykłady: Analityka Chemiczna, Podstawy analizy statystycznej wraz Wykorzystanie metod chemiometrycznych. Na studiach II stopniach prowadziła zajęcia: Chemia Teoretyczna, Zastosowanie matematyki w chemii. Opiekowała się trójką studentów w czasie wykonywania ich prac licencjackich i magisterskich. Uczestniczy w pracach na rzecz Wydziału, np. w wielu pracach komitetów do spraw wysokiej jakości międzynarodowych i interdyscyplinarnych programów studiów doktoranckich.



Uzyskanie stopnia naukowego doktora habilitowanego przez Panią Doktor pozwoli z pewnością na utworzenie zespołu badawczego oraz przyciągnięcie do współpracy studentów-magistrantów i doktorantów.

V. Wniosek końcowy

Podsumowując, uważam, że dorobek naukowy Pani dr Iwony Gulaczyk jest wartościowy i stanowi wkład w rozwój metod badawczych substancji chemicznych. Ocena ta, w połączeniu z przytoczoną wyżej pozytywną oceną osiągnięcia habilitacyjnego, prowadzi do wniosku, że spełnione są wymogi Ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki. Przewodzę wniosek o dopuszczenie dr Iwonę Gulaczyk do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

Joanna Sadlej