



RP/1/4149/2022 N
Data: 2022-02-16

Toruń, 14 lutego 2022

Dr hab. Jolanta Domysławska
Instytut Fizyki
Wydział Fizyki Astronomii i Informatyki Stosowanej
Uniwersytet Mikołaja Kopernika
ul. Grudziądzka 5
87-100 Toruń

Ocena osiągnięć i dorobku naukowego dr Iwony Gulaczyk w związku z postępowaniem o nadanie stopnia doktora habilitowanego

Informacje ogólne o kandydatce

Pani doktor Iwona Gulaczyk ukończyła studia magisterskie na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu w roku 1994 broniąc pracę pt.: „Badanie zanieczyszczeń powietrze metodą spektroskopii w podczerwieni o wysokiej rozdzielczości (promotor: prof. dr hab. Marek Kreglewski). Warto zauważyć, że czwarty rok studiów (1992-1993) odbyła w Wielkiej Brytanii w Reading University w ramach międzynarodowej wymiany studenckiej (program Tempus). W latach 1994-2000 odbyła studia doktoranckie na tymże Wydziale. W roku 1999 ukończyła studia podyplomowe z Sieci komputerowych na Wydziale Elektrycznym Politechniki Poznańskiej. W roku 2000 uzyskała stopień doktora nauk chemicznych w zakresie chemii na podstawie rozprawy doktorskiej pod tytułem „Analiza widma rotacyjno-wibracyjnego hydrazyny i etylenu” pod kierunkiem prof. dra hab. Marka Kreglewskiego.

Od początku swojej działalności naukowej i zawodowej pani dr Iwona Gulaczyk jest związana z Uniwersytetem im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, obecnie jest zatrudniona na Wydziale Chemii UAM w Zakładzie Chemii Kwantowej na stanowisku starszego wykładowcy od 2014 roku. Wcześniej pracowała jako adiunkt (2002-2014) i wykładowca (2000-2002) w Zakładzie Chemii Teoretycznej Wydziału Chemii UAM. Równoległe z odbywaniem studiów doktoranckich pani dr Gulaczyk pracowała jako nauczyciel informatyki w szkole podstawowej (1996-1997) oraz była zatrudniona na stanowisku inżynierjno-technicznym (I-IX 1994) w Zakładzie Magnetochemii WCh UAM. Należy też odnotować przerwy w zatrudnieniu z racji urlopów macierzyńskich w latach 1997, 1999, 2004.

Ocena osiągnięcia naukowego

Na osiągnięcia naukowe przedstawione przez panią dr Iwonę Gulaczyk we wniosku składa się cykl ośmiu publikacji 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”.

Wszystkie artykuły zostały opublikowane w czasopismach naukowych o zasięgu międzynarodowym, znajdujących się w bazie *Journal Citation Report*, tj. *Journal of Molecular Spectroscopy* (5 publikacji), *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* (2 publikacje) i *Molecular Physics* (1 publikacja). Sumaryczny *Impact Factor* dla publikacji składających się na osiągnięcie habilitacyjne wynosi 15.54 a sumaryczna liczba punktów wg. wykazu czasopism punktowanych MEiN wynosi 620. Przedstawione jako osiągnięcie habilitacyjne publikacje są wieloautorskie, mają od 2 do 4 autorów, pierwszym autorem jest w każdej z nich dr Iwona Gulaczyk, w trzech (H6-H8) jest również autorem korespondencyjnym. Z oświad-

czeń współautorów wynika, że miała ona wiodącą rolę w powstaniu tych prac. Swoją wkład w powstanie tych publikacji oszacowała na 70 do 90 % (średnio 76.25%). Dr Iwona Gulaczyk wyprowadziła elementy macierzowe hamiltonianów odpowiadające za sprzężenia inwersyjno-torsyjne w cząsteczce hydrazyny i metyloaminy [H1, H3], wykonała wszystkie obliczenia i analizy, dokonała porównania z wynikami doświadczalnymi dostarczonymi przez V-M. Hornemana, przygotowała teksty publikacji oraz uczestniczyła aktywnie w korespondencji z edytorami i recenzentami.

Celem przedstawionych badań było wyprowadzenie wibracyjno-rotacyjnych efektywnych hamiltonianów uwzględniających sprzężenie inwersyjno-torsyjne cząsteczek wykonujących drgania o dużej amplitudzie oraz wykorzystanie ich w analizie widm hydrazyny N_2H_4 [H1, H2] i metyloaminy CH_3NH_2 [H3-H8]. W hydrazynie występują trzy drgania o dużej amplitudzie, są to to dwie inwersje grup $-NH_2$ oraz wewnętrzna rotacja (torsja) wokół wiązania N-N, natomiast w metyloaminie występują dwa drgania o dużej amplitudzie: inwersja grupy aminowej $-NH_2$ i torsja grupy metylowej $-CH_3$ wokół wiązania C-N.

Praca teoretyczna [H1] poświęcona jest wyprowadzeniu hamiltonianu efektywnego uwzględniającego sprzężenie inwersyjno-torsyjne w cząsteczce N_2H_4 . W obliczeniach elementów macierzowych uwzględniona została podwójna grupa symetrii $PI - G_{16}^{(2)}$ w przeciwieństwie do wcześniejszych prac, gdzie stosowano tylko grupę G_{16} . W pracy szczegółowo pokazano procedurę wyprowadzania elementów macierzowych hamiltonianu, omówiono 8 konfiguracji równowagowych dla cząsteczki hydrazyny, wyjaśniono sposób tworzenia tabeli przekształceń dla grupy symetrii $G_{16}^{(2)}$ przy pomocy arkusza Excel. W publikacji tej przeanalizowano dwa przypadki sprzężenia. Pierwszy, gdzie obliczono elementy macierzowe dla dwóch stanów symetrycznych względem rotacji wokół osi C_2 cząsteczki, tj. stanu inwersyjnego symetrycznego ν_6 i trzeciego wzbudzonego stanu torsyjnego $3\nu_7$ (oddziaływanie typu A-A). Drugi przypadek - rezonans między stanem inwersyjnym antysymetrycznym ν_{12} i trzecim wzbudzonym stanem torsyjnym $3\nu_7$ (oddziaływanie typu A-B). Otrzymane wyniki teoretyczne potwierdziły dotychczasowe obserwacje dla hydrazyny, tzn. silne zaburzenia między stanami o jednakowej symetrii (A-A) i nie występowanie zaburzeń dla stanów o symetrii A-B.

W kolejnej pracy [H2] przeanalizowano widmo hydrazyny w zakresie od 729 do 1198 cm^{-1} . Po raz pierwszy zostało zaobserwowane i zanalizowane pasmo ν_6 pokrywające się z dużo silniejszym pasmem inwersyjnym antysymetrycznym ν_{12} . Pasma ν_6 było silnie zaburzone, zaobserwowano przesunięcie niektórych linii nawet o 10 cm^{-1} . Na podstawie wcześniejszych obliczeń teoretycznych założono, że zachodzi oddziaływanie z trzecim wzbudzonym stanem torsyjnym $3\nu_7$. Przeanalizowano 3392 linie z pasma ν_6 i 428 linii z pasma $3\nu_7$ nie obserwowanych wcześniej. Wyniki dopasowań potwierdziły wcześniejsze założenie.

Następne prace [H3-H8] dotyczą cząsteczki metyloaminy. W pracy [H3] zostały wyznaczone elementy macierzowe hamiltonianu efektywnego uwzględniające sprzężenie inwersyjno-torsyjne dla stanu inwersyjnego ν_9 (symetryczny względem płaszczyzny symetrii grupy $-NH_2$) oddziałujący z trzecim ($3\nu_{15}$ -antysymetryczny względem płaszczyzny symetrii) lub czwartym wzbudzonym stanem torsyjnym ($4\nu_{15}$). Stan $4\nu_{15}$ jest również symetryczny względem płaszczyzny symetrii grupy $-NH_2$. Analiza otrzymanych wyników pokazała, że oba stany torsyjne, tzn. $3\nu_{15}$ i $4\nu_{15}$ mogą zaburzać stan inwersyjny ν_9 , przy czym zaburzenie globalne typu Fermiego pochodzi tylko od stanu $4\nu_{15}$ a zaburzenie lokalne typu Coriolisa może być pochodzić od obu wzbudzonych stanów torsyjnych.

W kolejnych pracach poddano analizie widmo metylaminy. Celem pracy [H4] była kompletna analiza pasma inwersyjnego ν_9 . W tym celu wykonano pomiary widma metyloaminy w zakresie 640-960 cm^{-1} z wysoką rozdzielczością. Dopasowano około 13000 przejść, wykorzystując wyniki wyprowadzone w pracy

[H3], co podwoiło liczbę zidentyfikowanych linii i pozwoliło potwierdzić wcześniejsze wnioski dotyczące sposobu oddziaływania stanów torsyjnych $3\nu_{15}$ i $4\nu_{15}$ na stan inwersyjny ν_9 . W pracy [H5] wykonano analizę widma metyloaminy w zakresie od 960 do 1200 cm^{-1} . Zidentyfikowano ponad 3500 przejść z pasma rozciągającego C-N cząsteczki metyloaminy (ν_9). Z przeprowadzonych analiz wynika, że czwarty wzbudzony stan torsyjny $4\nu_{15}$ jest tu źródłem zaburzenia Fermiego, natomiast obserwowane są też w widmie sprzężenia Coriolisa, które mogą być skutkiem oddziaływania z trzecim wzbudzonym stanem torsyjnym $3\nu_{15}$ lub/i stanem kombinacyjnym $\nu_9 + \nu_{15}$. W pracy [H6] przeprowadzono analizę widma metyloaminy w zakresie od 40 do 360 cm^{-1} (podstawowe pasmo torsyjne ν_{15}). Ponad 11700 linii zostało zidentyfikowanych. Analiza pasma torsyjnego pozwala na obliczenie wartości energii rowibracyjnych z dokładnością pozwalającą na zastosowanie ich do dalszych analiz, tj. analizy pasm gorących metyloaminy takich jak $\nu_{15} \rightarrow \nu_{15}$, $\nu_{15} \rightarrow 3\nu_{15}$, $\nu_{15} \rightarrow 4\nu_{15}$. W kolejna praca [H7] poświęcona była analizie zakresu widmowego od 40 do 720 cm^{-1} , gdzie występują dwa pasma, tzn. drugi nadton pasma torsyjnego $\nu_{15} = 2 \leftarrow 0$ i pasmo gorące $\nu_{15} = 2 \leftarrow 1$. Przeprowadzono pierwszą kompletną analizę drugiego wzbudzonego stanu torsyjnego, $2\nu_{15}$, gdzie ponad 14400 przejść zostało zidentyfikowanych. Ostatnia praca [H8] poświęcona została analizie widma rotacyjnego metyloaminy w zakresie 40-360 cm^{-1} , w wibracyjnym stanie podstawowym, pierwszym i drugim wzbudzonym stanie torsyjnym. Zidentyfikowano około 8300 nowych przejść. Wyznaczone parametry molekularne mogą być wykorzystane do obliczenia rowibracyjnych dla wyższych stanów torsyjnych i w dalszej perspektywie do analizy sprzężeń stanów ν_9 , $3\nu_{15}$ i $4\nu_{15}$.

Inne osiągnięcia i aktywność naukowa

Dr Iwona Gulaczyk poza cyklem publikacji przedstawionym jako osiągnięcie habilitacyjne wymienia 3 rozdziały w monografiach naukowych, 9 publikacji w czasopismach z bazy *JCR*, (w tym 2 przed doktoratem) i 6 publikacji w czasopismach spoza bazy *JCR*. Artykuły ukazały się w następujących czasopismach: *Journal of Molecular Spectroscopy*, *Chemical Physics Letters*, *Canadian Journal of Physics*, *Journal of Catalysis*, *Journal of Molecular Structure*, najnowsza publikacja ukazała się w *Coordination Chemistry Reviews* (IF 22.315). Pani dr Gulaczyk jest współautorką 27 komunikatów konferencyjnych (w tym 25 po doktoracie), wygłosiła 5 komunikatów ustnych i 2 wykłady zaproszone.

Dr Iwona Gulaczyk podaje dane naukometryczne na dzień 1 lipca 2021: ogólna liczba publikacji 20, w tym 17 w czasopismach z bazy *JCR*, IH=6 (Scopus i Web of Science), liczba cytowań w bazie Scopus 137 (99 bez autocytowań) i w WoS 92 (62 bez autocytowań). Duża różnica w cytowaniach między Bazą Scopus i WoS wynika z faktu, że ta druga nie uwzględnia publikacji [B3] (wykaz osiągnięć, pkt. 2.2), tak więc w lutym 2022 liczba cytowań w WoS z uwzględnieniem pracy [B3] wynosiłaby 141 (102 bez autocytatów). Sumaryczny IF wynosi 41.451 (56.991 łącznie z cyklem prac H1-H8), a suma punktów za publikacje z listy MEiN wynosi 800 (1420 łącznie z cyklem prac H1-H8).

Pani dr Iwona Gulaczyk prowadzi **aktywną współpracę naukową** z ośrodkami zagranicznymi, którą rozpoczęła będąc jeszcze doktorantką. Poprzedni lub obecni współpracownicy, to:

- Prof. André Fayt - Uniwersytet Katolicki w Leuven-La-Neuve, Belgia i Prof. Jos Oomens, Nijmegen – Radboud University w Nijmegen, Holandia - publikacja [B1],
- Dr Alain Valentin – Université de Paris, Francja - [B2, B3],
- Prof. Veli-Mati Horneman – Uniwersytet w Oulu, Finlandia - efektem współpracy są publikacje [H4-H7] wchodzące w skład osiągnięcia habilitacyjnego,
- Prof. Isabelle Kleiner - Laboratoire Interuniversitaire des Systemes Atmosphériques (LISA), Université Paris-Est Créteil (UPEC), Francja - [B6, B9],

- Prof. Pierre Asselin – Sorbonne Universite, CNRS, MONARIS, Paris, France - [B6],
- Prof. Roman Motiyenko - Laboratoire PhLAM UMR 8523 CNRS - Université de Lille, Francja - [B15],
- Prof. Mariusz Pietrowski – Zakład Technologii Chemicznej, Wydział Chemii UAM - [B7]
- Dr Bartosz Tylkowski – Eurecat, Chemical Technologies Unit, Tarragona, Hiszpania - [B11-B13],
- Prof. Nuno Bandeira – Faculty of Sciences, University of Lisbon, Portugalia. Prof. Marta Giamberini i Prof. Ricard Garcia-Valls - Department of Chemical Engineering, Universitat Rovira i Virgili, Tarragona, Hiszpania,
- Dr Sergey K. Krasnoshchekov - Department of Chemistry, Lomonosov Moscow State University, Rosja.

Dr Iwona Gulaczyk była dwukrotnie wykonawcą w Projekcie PECO: „*Experimental and theoretical determination of spectroscopic constants and molecular properties for stable and reactive species of atmospheric, astrophysical and chemical importance.*” oraz w Projekcie badawczym Nr 2 P303 050 06, głównym wykonawcą w dwóch grantach: Grant PB 0943/T09/98/14, Grant MNiSW Nr NN 204 545739 (po doktoracie) oraz kierownikiem Grantu obliczeniowego *PL-Grid Infrastructure* (2013 rok).

Dr Iwona Gulaczyk odbyła **staż naukowy** na Katolickim Uniwersytecie w Louvain-la-Neuve w Belgii (Université Catholique de Louvain-la-Neuve) 2 pobyty w latach 1995-1996, łącznie ponad 4 miesiące. W ramach programu Erasmus+ odbyła tygodniowe wyjazdy naukowe do *University of Rovira i Virgili w Tarragonie, Hiszpania*, XII 2017, VII 2018 oraz do Université Paris-Est Créteil, UPEC, Francja, XII 2019.

Dr Iwona Gulaczyk była trzykrotnie członkiem komitetu organizacyjnego konferencji: *International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy* 1996, 2010 oraz *Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego i Stowarzyszenia Inżynierów i Techników Przemysłu Chemicznego* 1996.

Dr Iwona Gulaczyk jest członkiem Polskiego Towarzystwa Chemicznego.

Dr Iwona Gulaczyk jest członkiem *Chemistry Advisory Board* w *Cambridge Scholars Publishing: Newcastle Upon Tyne*. oraz *Editorial Board* w *Physical Sciences Reviews, de Gruyter*.

Dr Iwona Gulaczyk była recenzentem w *International Journal of Experimental Spectroscopic Techniques* (1) i *Pure and Applied Chemistry* (1).

Osiągnięcia dydaktyczne i w zakresie popularyzacji nauki lub sztuki

Pani dr Iwona Gulaczyk prowadzi bardzo bogatą działalność dydaktyczną. Opracowuje programy zajęć, materiały dydaktyczne i ćwiczenia laboratoryjne dla studentów na różnych etapach kształcenia i doktorantów zarówno w języku polskim jak i angielskim. Prowadzi zajęcia dla studentów na różnych etapach kształcenia i doktorantów w języku polskim i angielskim. Między innymi, prowadzi zajęcia dydaktyczne (komputerowe, proseminaria, laboratoria, ćwiczenia rachunkowe, kompensacyjne) dla studentów studiów I i II stopnia: *Obliczenia kwantowo-chemiczne fazy skondensowanej, Technologia informacyjna, Chemia kwantowo-obliczeniowa, Chemia teoretyczna, Theoretical Chemistry, English in Chemistry, Zastosowanie matematyki w chemii*. Opracowała program i prowadzi od 2008 zajęcia dla studentów anglojęzycznych AMU-PIE z przedmiotów: *Statistics, Databases for beginners, Introduction to Numerical Analysis, Basics of Chemometrics, Information Technology*. Prowadzi zajęcia dla studentów Studiów Podyplomowych Analityka Chemiczna z następujących przedmiotów: *Podstawy analizy statystycznej, Zaawansowane metody statystyczne, Wykorzystanie metod chemometrycznych* od 2010 roku. Można też wymienić prowadzenie szkolenia dla kadry akademickiej *Bazy danych i profesjonalne oprogramowanie wykorzystywane w pracy dydaktycznej* oraz zajęcia w języku angielskim dla doktorantów *Mobility opportunities in scientific career*

w ramach projektu Międzynarodowych Studiów Doktoranckich *ChemInter*.

Pani dr Iwona Gulaczyk była promotorem pomocniczym pracy licencjackiej (2016/2017), promotorem pomocniczym pracy doktorskiej (2015-2018) oraz sprawowała opiekę naukową nad doktorantką w ramach programu Erasmus+ (15 VII - 16 IX 2019).

Pani dr Iwona Gulaczyk za działalność dydaktyczną dostała Nagrodę Władz Dziekańskich Wydziału Chemii - LONGO SED PROXIMUS INTERVALLO (2017).

Pani dr Iwona Gulaczyk w ramach działalności popularyzatorskiej wygłosiła wykład z cyklu Uniwersyteckich Wykładów Otwartych *Chemia w wielu wymiarach* pt: *Duch, widmo i spektroskopia* (I 2017) i wykład zaproszony na seminarium multidyscyplinarnym dla doktorantów w Chemical Engineering Department of the University Rovira i Virgili w Tarragonie, Hiszpania, pt: *Spectroscopy and dynamics of floppy molecules*(IV 2017).

Działalność organizacyjna

Pani dr Iwona Gulaczyk jest Wydziałowym Koordynatorem Programu Erasmus+ od 2014 roku. Jest koordynatorem i głównym wykonawcą projektu NCBiR: WIND-POWR.03.03.00-00-M150/16-01 *Chemistry-przyszłość międzynarodowego rozwoju polskiej branży chemicznej*. Od 2017 roku jest koordynatorem kierunku Chemii na Wydziale Chemii UAM. Była członkiem zespołu ds. Oceny Jakości Kształcenia Wydziałowej Komisji do Spraw Jakości Kształcenia (2010 do 2016) oraz członkiem zespołu ds. Zapewnienia Jakości Kształcenia na Wydziale Chemii UAM (2016 do 2019). Jest członkiem trzech Komisji Eksperckich w projektach POWR.

Za działalność organizacyjną dr Iwona Gulaczyk dostała Nagrodę Rektora Zespołową III stopnia (2019).

Konkluzja

Biorąc pod uwagę przedstawione do oceny osiągnięcie naukowe w postaci jednotematycznego cyklu publikacji zatytułowanego „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”, dorobek naukowy, dydaktyczny i organizacyjny oraz współpracę międzynarodową pani dr Iwony Gulaczyk w związku z postępowaniem habilitacyjnym prowadzonym przez Radę Naukową Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza stwierdzam, że spełnione są wymogi stawiane kandydatom do stopnia naukowego doktora habilitowanego w art. 219 ust. 1 pkt. 2 oraz pkt. 3 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (DZ. U. z 2018 r. poz. 1668 ze zm.). Wnioskuję zatem o dopuszczenie pani dr Iwony Gulaczyk do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

Jolanta Dąbrowska

