

prof. dr hab. Zdzisław Latajka
Wydział Chemii
Uniwersytetu Wrocławskiego
ul. F.Joliot-Curie 14
50-383 Wrocław

Wrocław, dnia 17.02.2012 r.

Ocena dorobku naukowego stanowiącego podstawę do nadania stopnia naukowego doktora habilitowanego dr Annie Ignaczak

Dr Anna Ignaczak w 1989 roku ukończyła studia wyższe na Wydziale Matematyki, Fizyki i Chemii Uniwersytetu Łódzkiego. Zaraz po studiach została zatrudniona w Zakładzie Chemii Teoretycznej Uniwersytetu Łódzkiego zajmując kolejno stanowiska: asystenta stażysty (1989-1990), asystenta (1990-1998), adiunkta (1998-2010) i starszego wykładowcy (od 2010 roku) w Katedrze Chemii Teoretycznej i Strukturalnej.

W latach 1994-1997 odbyła studia doktoranckie na Uniwersytecie w Porto (Portugalia), które zakończyły się obroną pracy doktorskiej pt. "The specific adsorption of halogen ions on the noble metals: the theoretical approach". Promotorami rozprawy doktorskiej byli: prof. dr hab. Jose A. N. Ferreira Gomes z Uniwersytetu w Porto i prof. dr hab. Stanisław Romanowski z Uniwersytetu Łódzkiego.

Całkowity dorobek Habilitantki obejmuje 22 oryginalne opublikowane prace naukowe znajdujące się w czasopiśmie z listy filadelfijskiej. Dorobek naukowy w okresie do uzyskania stopnia naukowego doktora to 5 prac. Z tego wynika, że po doktoracie dorobek dr Anny Ignaczak stanowi 17 prac. Nie jest to dorobek imponujący, lecz wystarczający do habilitacji. Całkowity IF, w zależności od sposobu określania, wynosi 43,619 (liczony na podstawie IF czasopism z lat opublikowania prac) lub 53,242 (IF czasopism za rok 2010). Prace były cytowane przez innych autorów 238 razy (bez autocytowań wszystkich autorów) a indeks Hirscha wynosi 8.

Dr Anna Ignaczak w latach 2001-2002 przebywała na 16-miesięcznym stażu podoktorskim na Uniwersytecie w Ulm w zespole prof. Wolfganga Schmicklera. Natomiast w latach 2004-2009 odbywała w tym zespole krótsze staże naukowe.

Podstawę wniosku do uzyskania stopnia naukowego doktora habilitowanego stanowi monotematyczny cykl 7 prac dotyczących teoretycznej elektrochemii, a w szczególności jest poświęcony badaniom teoretycznym wpływu drgań wewnątrzcząsteczkowych na kinetykę oraz mechanizm elektrochemicznej redukcji, w których następuje rozerwanie wiązania. Prace zostały opublikowane w latach 2002-2011 w następujących czasopismach: Chemical Physics (1 praca), Journal of Electroanalytical Chemistry (1 praca) i Electrochimica Acta (5 prac). A zatem wszystkie prace zostały publikowane w czasopismach o IF większym od 2. Ponadto, prace już zostały zauważone przez innych autorów, o czym świadczy liczba 45 cytowań. Cztery prace są monoautorskie. Dla trzech pozostałych stosowne oświadczenia dr Anny Ignaczak a także prof. Wolfganga Schmickera nie pozostawiają cienia wątpliwości o wiodącej roli Habilitantki w badaniach naukowych opisanych w pracach. Do rozprawy dołączony jest krótki autoreferat liczący 24 strony.

Wymiana elektronu między elektrodą metalową a solwatowanym akceptorem lub donorem jest jednym z najważniejszych procesów elektrochemicznych. Mogą one prowadzić do tworzenia nowego wiązania lub rozerwania już istniejącego. W cyklu prac Habilitantka skoncentrowała się na procesach rozrywania wiązania pod wpływem transferu elektronu (bond-breaking electron transfer, BBET). Podstawą modelu teoretycznego jest połączenie hamiltonianu zaproponowanego przez Kopera i Votha (z pewnymi modyfikacjami) z symulacjami za pomocą metod dynamiki molekularnej. Przyjęty został dwuwymiarowy model potencjału, bazujący na współrzędnej rozpuszczalnika i wiązania ulegającemu rozerwaniu. W pracach rozpatrywane są dwa przypadki: oddziaływanie między cząsteczką i elektrodą są silne – wówczas są to reakcje adiabatyczne i stosowany jest inne podejście, oraz przypadek słabych oddziaływań, w których istotny wpływ na wielkość szybkości reakcji będą miały efekty kwantowe związane ze stanami wibracyjnymi cząsteczki przed i po redukcji.

W pierwszych trzech pracach, oznaczonych w spisie prac stanowiących podstawę habilitacji jako JCP1, JCP3 i JCP4, przedstawiono wyniki symulacji dla układów modelowych. Przede wszystkim przedstawiono bardzo szczegółową analizę wpływu następujących czynników na kinetykę procesu: zmian struktury modelu cząsteczki poddanej redukcji elektrochemicznej, lepkości rozpuszczalnika, temperatury oraz siły oddziaływania z elektrodą. I tak w pracy JCP1 dr Anna Ignaczak wykazała, że np. zwiększenie nadpotencjału lub siły oddziaływania między cząsteczką i elektrodą prowadzi do wzrostu stałej szybkości reakcji. Ponadto uzyskano prawidłowy przebieg zmian szybkości reakcji w funkcji współczynnika lepkości.

W pracy JCP2 została przedstawiona bardzo wnikliwa analiza stałych szybkości reakcji, dla których powierzchnie potencjału zależały od tzw. parametru asymetrii, czyli ilorazu częstotliwości drgań w substracie i produkcie a także w zależności od współczynników lepkości zewnętrznej i wewnętrznej. Z kolei w pracy JCP4 przedstawiono badania porównawcze adiabaticznego i nieadiabaticznego mechanizmu reakcji. W tej pracy uzyskano wiele wartościowych wyników. Dla średniej mocy oddziaływania między elektrodą i reagentem oba rozważane mechanizmy reakcji odgrywają porównywalną rolę, co w efekcie wpływa na wypadkową szybkość reakcji (k_{av}). Badania również wykazały, że ważną rolę w tym przypadku odgrywa częstotliwość drgań wiązań. Dla modelowych układów charakteryzujących się wysoką częstotliwością drgań wiązań założony mechanizm adiabaticzny prowadzi do spowolnienia reakcji. Inny obraz uzyskano dla związków opisanych niską częstotliwością – ten efekt jest mniejszy a stała k_{av} szybciej rośnie ze wzrostem mocy oddziaływania między reagentem i elektrodą.

W następnych czterech pracach, tj. JCP2, JCP5 – JCP7, przedstawiono wyniki badań wpływu drgań wewnątrzcząsteczkowych na stałą szybkości reakcji redukcji halogenków tert-butylu, czyli chlorku i bromku tert-butylu. Wybór tych układów molekularnych nie był przypadkowy. Dla halogenków alkilowych istnieje sporo danych doświadczalnych oraz są traktowane jako modelowe układy do badań procesów elektrochemicznych, w których zachodzi dysocjacja wiązania, $t\text{-Bu-X} + e^- \rightarrow t\text{-Bu} + X^-$ (gdzie $X = \text{Cl}$ i Br). Krzywe energii potencjalnej wiązania C-X dla $t\text{-Bu-X}$ i $t\text{-Bu-X}^-$ były wygenerowane za pomocą metod chemii kwantowej z korelacją elektronową na poziomie MP2 lub DFT (B1LYP) a następnie do otrzymanych wartości numerycznych krzywej dopasowano odpowiednio dobrane funkcje analityczne (funkcje wykładnicze okazały się być najlepsze). W tym miejscu mam uwagę krytyczną. Uważam, że nie powinno się używać baz funkcyjnych bez funkcji polaryzacyjnych w obliczeniach korelacyjnych. A tak właśnie zrobiono w pracach JCP2, JCP5 i JCP7. Atom chloru opisano bazą funkcyjną 6-31G(d) a pozostałe atomy za pomocą bazy funkcyjnej 6-31G. Otrzymana wartość częstotliwości dla drgania rozciągającego C-Cl jest bardzo dobrej zgodności z wartościami doświadczalnymi (np. tabela 1 w pracy JCP2). Uważam, że ta prawie idealna zgodność jest efektem kompensacji błędów. Mam również wątpliwości na ile wiarygodna jest krzywa energii potencjalnej wiązania C-Cl dla układu $t\text{-Bu-Cl}$, przedstawiona na rys. 2 w tej pracy. Generowanie dokładnych krzywych energii wiązań nie jest łatwym zadaniem i wymaga zastosowania bardziej zaawansowanych metod chemii

kwantowej niż MP2 i znacznie większych baz funkcyjnych, zwłaszcza dla układów anionowych.

Jedną z najbardziej wartościowych prac jest ostatnia w tym cyklu, oznaczona jako JCP7, w której przeprowadzono badania porównawcze dla chlorku i bromku tert-butyłu. Dobierając odpowiednie wartości nadpotencjału Habilitantka uzyskała tą samą wartość wysokości bariery w punkcie siodłowym dla obu molekuł. Takie podejście umożliwiło analizę koncentrując się różnicach wynikających ze specyficznych własności układów. Na podstawie wyników symulacji wykazano istotne różnice w stałych szybkości reakcji mimo jednakowej wysokości bariery. Dr Anna Ignaczak pokazała również istnienie zależności między temperaturą a współczynnikiem przejścia α . Poprawność przyjętego modelu została potwierdzona bardzo dobrą zgodnością obliczonej wartości współczynnika przejścia z wartością eksperymentalną dla bromku tert-butyłu. Również wartościowa jest analiza porównawcza wartości współczynnika przejścia dla obu układów.

W podsumowaniu pragnę stwierdzić, że wysoko oceniam poziom badań naukowych przedstawiony w cyklu prac stanowiących podstawę do uzyskania habilitacji. O randze uzyskanych wyników dodatkowo świadczą czasopisma naukowe, w których zostały opublikowane. Są to istotne i pionierskie prace z zakresu modelowania procesów elektrochemicznych. Na specjalne podkreślenie zasługuje to, iż dr Anna Ignaczak jest autorką programów komputerowych, a nie korzystała z gotowych kodów komputerowych, co obecnie jest prawie regułą w pracach habilitacyjnych i doktorskich.

Przechodząc do oceny pozostałego dorobku naukowego dr Anny Ignaczak, zwłaszcza po uzyskaniu stopnia doktora, to jest on również bardzo wartościowy. Wszystkie prace zostały opublikowane w bardzo dobrych lub dobrych międzynarodowych czasopismach. We wszystkich pracach, z wyjątkiem jednej, Habilitantka jest pierwszym autorem, co świadczy o jej wiodącej roli w prowadzonych badaniach naukowych.

Dr Anna Ignaczak uczestniczyła w realizacji dwóch europejskich projektów badawczych. Również swoje wyniki prezentowała na 3 międzynarodowych konferencjach naukowych.

Dr Anna Ignaczak ma bogate doświadczenia dydaktyczne. Z oświadczenia prof. Wolfganga Schmicklera wynika, że przez kilka miesięcy, kiedy on przebywał na urlopie naukowych (sabbatical) kierowała jego zespołem naukowym nadzorując 5 doktorantów. Na macierzystej uczelni była promotorem 3 prac magisterskich.

Dr Anna Ignaczak jest dojrzałą i samodzielna uczoną, który prowadzi interesujące badania naukowe. Na podstawie oceny zarówno cyklu prac stanowiących podstawę do uzyskania habilitacji oraz pozostałego dorobku naukowego stwierdzam, że w wystarczającym stopniu są spełnione wszelkie wymagania ustawy z dnia 14 marca 2003 roku „O stopniach naukowych i tytule naukowym oraz stopniach w zakresie sztuki” (Dz.U. nr 65 poz. 595 wraz z późniejszymi zmianami) oraz rozporządzenia Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 1 września 2011 roku w sprawie kryteriów oceny osiągnięć osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego. Dlatego też wnoszę o dopuszczenie dr Annę Ignaczak do dalszych etapów związanych z nadaniem jej stopnia naukowego doktora habilitowanego nauk chemicznych.



prof. dr hab. Zdzisław Latajka