



Dr hab. Aleksander Filarowski prof. UWr

Wrocław, 04/12/2019

Zakład Chemii Fizycznej

Wydział Chemii,

Uniwersytet Wrocławski

Recenzja rozprawy doktorskiej magister Anety Lutyńskiej pt.: „Wybrane efekty towarzyszące słabym oddziaływaniom w układach dwu- i trójciałowych”.

Przedstawiona rozprawa doktorska Pani magister Anety Lutyńskiej została wykonana w Katedrze Chemii Fizycznej na Wydziale Chemii Uniwersytetu Łódzkiego. Promotorem pracy doktorskiej był Pan Profesor Marcin Palusiak a promotorem pomocniczym dr Małgorzata Domagała.

Rozprawa doktorska Pani magister Anety Lutyńskiej dotyczy bardzo interesujących i ważnych badań wiązań niekowalencyjnych prowadzonych metodami kwantowo-mechanicznymi. Integralną część rozprawy stanowi zbiór publikacji do niej załączony. Rozprawa ma strukturę klasyczną i składa się z 7 rozdziałów i 15 podrozdziałów. Przegląd literatury zawiera 24 strony, opis wyników własnych i podsumowanie w języku polskim i angielskim 38 stron. Na końcu rozprawy jest przedstawiony spis 147 odnośników. Od strony redakcyjnej dysertacja jest przedstawiona starannie, a trafnie dobrane rysunki, ilustrujące dyskutowane zagadnienia, nie budzą zastrzeżeń.

We „Wprowadzeniu” rozprawy doktorskiej opisane zostały zagadnienia i definicje oddziaływań niekowalencyjnych (wiązania wodorowe, wodorkowe, halogenowe i chalkogenowe). Następne dwa rozdziały rozprawy doktorskiej opisują cele, zakres pracy i dyskusje wyników.

Za najważniejsze osiągnięcia przedstawionej rozprawy doktorskiej uważam:

Wykazanie, że energia kompleksowania w przypadku wiązania halogenowego (CAXB(+/-)), w kompleksach chinuklidyny, wspomaganego podwójnym ładunkiem jest znacznie większa niż *klasycznego* wiązania halogenowego. Na podstawie analizy parametrów

strukturalnych i obliczeń QTAIM pokazano, że w badanych układach znaczną rolę odgrywa przeniesienie ładunku.

Potwierdzenie istnienia kompleksów XCH_3 , XCF_3 ($X = Cl, Br$ i I), HNC , HCN , $HCOOH$ oraz HCN/H_2O stabilizowanych zarówno wiązaniem wodorowym jak i wiązaniem halogenowym. Takie podejście wskazuje na poprawność prowadzonych badań, gdyż większość badaczy, z reguły, skupia się na jednym typie oddziaływań. Autorka przedstawiła analizę oddziaływań pomiędzy $CF_3 \cdots H_2O \cdots HCOOH$. Wykazano dominujący charakter wiązania wodorowego nad wiązaniem halogenowym. Również, udowodniona została bardzo słaba kooperatywność oddziaływań w badanych układach. Na podstawie obliczeń QTAIM pokazano kierunkowy charakter wiązania wodorowego i halogenowego. Pokazano znaczny wpływ grupy elektrono-akceptorowej CF_3 na wiązanie wodorowe i halogenowe – znaczne wzmocnienie wiązania halogenowego i osłabienie siły wiązania wodorowego w układach konkurencyjnych.

W rozprawie doktorskiej nie znalazłem *wniosków* w rozdziale 2.3.4, jak to jest przedstawione w rozdziałach 2.3.1 – 2.3.3. Moim zdaniem rozdział *Podsumowanie* mógłby być bardziej obszerny. Powyższe uwagi nie wpływają na moją pozytywną ocenę recenzowanej rozprawy doktorskiej Pani magister A. Lutyńskiej.

W przedstawionej rozprawie doktorskiej nie znalazłem błędów merytorycznych. Warto również podkreślić, że zaprezentowany przez Panią magister A. Lutyńską materiał badawczy jest skonkretyzowany co świadczy o głębokim zapoznaniu się Pani magister A. Lutyńskiej z przedstawioną tematyką badawczą.

Po analizie rozprawy doktorskiej i dorobku naukowego Pani magister A. Lutyńskiej stwierdzam, że jest ona badaczem przygotowanym do prowadzenia pracy naukowej. Opis przedstawionych badań niewątpliwie przyczyni się do rozwoju badań oddziaływań niekowalencyjnych. Uważam, że przedstawiona rozprawa Pani magister Anety Lutyńskiej spełnia wymagania „Ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym ...” z dnia 18 marca 2011 r z późniejszymi zmianami, oraz Ustawy z dnia 3 lipca 2018 r. „Przepisy wprowadzające ustawę – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce”, z późniejszymi zmianami, i wnoszę do Rady ds. stopni naukowych w dyscyplinie nauki chemiczne Wydziału Chemii Uniwersytetu Łódzkiego o dopuszczenie Pani magister Anety Lutyńskiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

A. Filarowski

Dr hab. Alerksander Filarowski prof. UW