

UNIwersytet im. ADAMA MICKIEWICZA

WYDZIAŁ CHEMII

ul. Grunwaldzka 6, 60-780 Poznań

Prof. dr hab. Marek Kręglewski

tel., fax. 61 8291387

Zakład Chemii Teoretycznej

e-mail: mkgreg@amu.edu.pl

---

Poznań, 16.03.2012

Ocena dorobku naukowego i recenzja rozprawy habilitacyjnej  
dr Anny Ignaczak

**Uwagi ogólne**

Dr Anna Ignaczak jest absolwentem Wydziału Matematyki, Fizyki i Chemii Uniwersytetu Łódzkiego. Już praca magisterska pt. *Wpływ drgań sieci krystalicznej na zjawisko adsorpcji tlenu na powierzchni glinu* wykonana w 1989 roku pod kierunkiem prof. dr hab. Leszka Wojtczaka ukierunkowała przyszłe zainteresowania naukowe dr Ignaczak. Koncentrują się one na teoretycznym opisie oddziaływań adsorbentów z powierzchnią metalu. Praca doktorska pod wspólnym promotorstwem prof. dr hab. José A. N. Ferreira Gomesa z Uniwersytetu w Porto i prof. dr hab. Stanisława Romanowskiego z Uniwersytetu Łódzkiego wykonana na studiach doktoranckich w Porto dotyczyła *Specyficznej adsorpcji jonów halogenkowych na metalach szlachetnych w ujęciu teoretycznym*. Praca doktorska obroniona w 1997 roku na Uniwersytecie w Porto została nostryfikowana na Wydziale Fizyki i Chemii Uniwersytetu Łódzkiego w 1998 roku.

Zawodowo dr Anna Ignaczak jest związana od początku swojej kariery, od 1989 roku, z Uniwersytetem Łódzkim – jako asystent stażysta, asystent, a po 12 latach na stanowisku adiunkta, od 2010 roku jako starszy wykładowca.

Od pierwszych lat pracy dr Anna Ignaczak intensywnie współpracuje z ośrodkami zagranicznymi budując swoją samodzielną pozycję na zainteresowaniach naukowych wyniesionych ze swojej macierzystej uczelni.

W rozwoju naukowym dr Anny Ignaczak warto podkreślić systematyczny rozwój jej kariery – po 1993 roku jest tylko jeden rok, w którym nie pojawiła się żadna publikacja. Każdy, kto samodzielnie opracowywał nowe modele zjawisk chemicznych, pisał efektywne programy próbując równocześnie interpretować wyniki eksperymentów, wie jak czasochłonny jest to proces.

### **Ocena dorobku naukowego**

W życiorysie naukowym dr Anny Ignaczak wyraźnie można wydzielić kilka etapów. Pierwsze trzy lata pracy na Uniwersytecie Łódzkim to budowanie warsztatu do pracy w obszarze chemii teoretycznej – okres niezbędny, aby w przyszłości móc rozwiązywać oryginalne problemy badawcze. Wspomnę opanowanie różnych technik obliczeń numerycznych oraz programowania w języku Fortran, a także metod opisu teoretycznego cienkich warstw.

Równolegle kształtują się zainteresowania Kandydatki zarówno opisem zjawisk w roztworach jak i oddziaływaniem z powierzchnią metalu. Kontakt z prof. José Gomes'em z Uniwersytetu w Porto określa temat pierwszej pracy poświęconej solwatacji jonu  $Ni^{2+}$  w roztworze wodnym, a następnie obszar pracy doktorskiej obejmującej zjawiska elektrochemiczne takie jak adsorpcja cząsteczek i jonów na granicy faz metal-roztwór. Wtedy Kandydatka wykształciła sposób wyjaśniania rzeczywistych zagadnień fizykochemicznych poprzez tworzenie modeli komputerowych symulujących obserwowane procesy. Charakterystyczne jest powiązanie metod symulacyjnych z obliczeniami kwantowochemicznymi. W pracy widać zarówno staranność w doborze techniki obliczeniowej z użyciem funkcjonału gęstości jak i w analizie wielkości klastra koniecznego do modelowania oddziaływań jonu z metalem.

Badania te zaowocowały serią dziewięciu wspólnych z prof. J.Gomes'em publikacji w znaczących czasopiśmie międzynarodowych, z których jedna to rozdział w monografii „Metal clusters in chemistry” wydanej przez prestiżowe wydawnictwo Wiley-VCH w 1999 roku.

Obroniona w 1997 roku na Uniwersytecie w Porto praca doktorska została nostryfikowana przez Radę Wydziału Fizyki i Chemii Uniwersytetu Łódzkiego w 1998 roku.

Najważniejsze osiągnięcia naukowe w pierwszych 10 latach pracy badawczej związane są z opisem solwatacji jonów (kationów i anionów) oraz oddziaływania jonów halogenków z powierzchnią metali z uwzględnieniem wpływu rozpuszczalnika. Wymagało to wstępnych badań poświęconych oddziaływaniu samego rozpuszczalnika (wody) z powierzchnią metalu. Metodologia badań to połączenie obliczeń kwantowochemicznych z wykorzystaniem programu Gaussian z modelowymi potencjałami rozwijanymi przez autorów oraz symulacji opartych na metodzie Monte Carlo.

W symulacji  $Ni^{+2}$  w roztworze wodnym autorzy wskazali na znaczenie oddziaływań trójciałowych dla poprawności opisu własności układu. Charakterystyczne dla prac z prof. Gomesem było określanie minimalnych czynników, które muszą być uwzględnione, aby uzyskać poprawny opis złożonego układu. Dla oddziaływań jonów halogenków z metalem określono minimalny rozmiar klastra atomów metalu na układ 12 atomów, przy czym klaster o tym rozmiarze musiał być uwzględniony także przy opisie oddziaływań cząsteczek wody z metalem. Autorka wykonała także badania nad wielkością klastrów wody koniecznych do opisanie oddziaływań jonów halogenkowych z rozpuszczalnikiem w bardzo rozcieńczonych roztworach. Ostatnią pracą z tego zakresu były obliczenia oddziaływań kationów metali alkalicznych z metalami szlachetnymi. I w tym przypadku autorka starannie zbadała, jaka wielkość bazy prowadziła do stabilnych i wiarygodnych wyników.

Wiedza o roztworach i oddziaływaniach z powierzchnią metali została przez Kandydatkę wykorzystana, gdy po roku 2000 podjęła nową tematykę elektrochemiczną zainspirowana spotkaniem z prof. W. Schmicklerem z Uniwersytetu w Ulm. Z tego zakresu pochodzą nie tylko prace zgłoszone do postępowania habilitacyjnego, ale także kilka dalszych. Tematyka to zostanie omówiona odrębnie przy ocenie rozprawy habilitacyjnej.

Dr Anna Ignaczak opublikowała poza dorobkiem przedstawionym jako praca habilitacyjna 16 prac oryginalnych o łącznym IF wynoszącym 30,283 (wg wartości IF za rok 2010), które były cytowane 239 razy (wg Web of Science z 2011 roku).

7 prac zgłoszonych do postępowania habilitacyjnego ma łączny IF wynoszący 22,959, a cytowane były 45 razy.

łącznie dorobek dr Anny Ignaczak to 23 prace o IF wynoszącym 53,242 cytowane 284 razy, co jest aktywnością uzasadniającą wystąpienie o stopień doktora habilitowanego.

## Recenzja rozprawy habilitacyjnej

Do postępowania habilitacyjnego dr Anna Ignaczak zgłosiła 7 prac zainspirowanych współpracą z prof. Wolfgangiem Schmicklerem, chemikiem teoretykiem z Uniwersytetu w Ulm zajmującym się teoretycznymi badaniami z zakresu elektrochemii. W latach 80-tych W.Schmickler rozpoczął badania nad symulacją procesów elektrochemicznych na elektrodach metalowych. Łącznie z pracami innych autorów, przed wszystkim J.-M. Savéanta z Université de Paris 7, W.Schmickler opracował teorię wykorzystującą metody dynamiki molekularnej do opisu układu elektroda – roztwór – reagent.

W chwili włączenia się do tych prac dr A.Ignaczak metoda była już stosowana przez innych autorów do badań nad procesami redukcji elektrochemicznej prowadzącymi do zerwania wiązania. Należy tu wspomnieć o pracach Koper i Vogta.

Model teoretyczny stosowany w obliczeniach przez dr A. Ignaczak jest ideowo podobny do wcześniej zaproponowanego przez W. Schmicklera, lecz wprowadza dodatkowe elementy istotne dla uzyskania zgodności z wynikami eksperymentalnymi.

Proces redukcji na elektrodzie opisany jest przez 3 człony Hamiltonianu:  $H_e$  – operator opisujący stany elektronu,  $H_{ph}$  – operator fononowy opisujący różne stany rozpuszczalnika,  $H_{in}$  – operator opisujący reorganizację reagenta w procesie redukcji.

Skoncentruję się na istotnych modyfikacjach wprowadzonych do modelu przez dr A.Ignaczak. Nowością jest opis reorganizacji reagenta oparty na wynikach obliczeń kwantowochemicznych. Drugim istotnym elementem jest rozszerzenie modelu teoretycznego o drugi wymiar związany z wewnętrzną reorganizacją reagenta. Należy wspomnieć, że pierwszym wymiarem w modelu Schmicklera jest zmiana konfiguracyjna rozpuszczalnika. Wprowadzenie do opisu dwóch wymiarów wymagało także poszerzonej dyskusji anizotropii współczynnika lepkości dla obu kierunków. Trzecim elementem nowości w pracach Kandydatki jest model nieadiabatyczny reakcji zrywania wiązania. Jest on konieczny, gdy oddziaływania między donorem a akceptorem jest słabe. Problem ten pojawia się, gdy różnice energii między zaangażowanymi w reakcji stanami reagenta przed i po redukcji są duże w porównaniu z energią termiczną.

Zastosowanie rozszerzonego modelu Schmicklera pozwoliło uzyskać dr Annie Ignaczak szereg interesujących rezultatów. Prace JCP1, JCP3 i JCP4 zawierają pogłębioną dyskusję przyjętych modeli opisu redukcji reagenta w roztworze wodnym na elektrodzie. Pokazano, że modele dają wyniki lepsze niż wcześniej stosowane: (1) dwuwymiarowy model właściwie opisuje trendy zmienności dla stałej

szybkości reakcji i dla współczynnika przejścia jako funkcji warunków reakcji (wartości nadpotencjału, lepkości), (2) mechanizmy adiabatyczny i nieadiabatyczny mogą być względem siebie konkurencyjne.

Prace JCP2 oraz JCP5-JCP7 to próba bardziej realistycznego opisu rzeczywistych procesów redukcji chlorków i bromków tert-butyłu. Metodą ab initio obliczono punkty na powierzchni potencjalnej wzdłuż trajektorii opisującej zrywanie wiązania C-Cl lub C-Br, dopasowano do nich analityczne potencjały, które następnie wykorzystano w modelu. Dla chlorku tert-butyłu uzyskano istotnie różne wyniki w stosunku do wcześniejszych wykonanych przez prof. W. Schmicklera dla potencjału Morse'a z arbitralnie dobranymi parametrami, co wskazuje na znaczenie wyznaczania powierzchni potencjalnej z obliczeń kwantowochemicznych. Zarówno dla mechanizmu adiabatycznego jak i nieadiabatycznego współczynnik przejścia maleje ze wzrostem lepkości, co jest zgodne z danymi doświadczalnymi.

Szczególnym testem modelu były obliczenia dla bromku tert-butyłu zaprezentowane w pracy JCP6. Skala obliczeń wymagała dostępu do superkomputerów i modyfikacji kodu umożliwiającej obliczenia równoległe. Ciekawym wynikiem było zgodne z danymi doświadczalnymi wyznaczenie współczynnika przejścia, podczas gdy wcześniej obliczane wartości były większe od danych doświadczalnych. Ostatnia z przedstawianych prac JCP7 zawiera porównanie wyników obliczeń dla obu reagentów chlorku i bromku tert-butyłu. W obu przypadkach współczynnik przejścia maleje ze wzrostem temperatury. Pokazano też różnice w kinetyce i mechanizmie reakcji dla obu reagentów. Podkreślić jednak należy, że dla chlorku tert-butyłu nie istnieją odpowiednie dane doświadczalne, a porównania można odnosić czy to do innych obliczeń modelowych lub do wyników dla bromku tert-butyłu.

Podsumowując przedstawiony cykl prac jest systematycznym rozwiązaniem nowego problemu badawczego i wykazuje wysokie kompetencje metodologiczne i techniczne dr Anny Ignaczak. Wszystkie prace są opublikowane w znaczących czasopismach o obiegu między narodowym.

Do dokumentacji dołączono oświadczenie prof. W.Schmicklera o jego wkładzie do prac współautorskich, których są cztery na siedem zgłoszonych do procedury habilitacyjnej. Według tych oświadczeń w dwóch pracach ich idea pracy była wynikiem wspólnej dyskusji, w dwóch pozostałych idee Kandydatki zostały tylko uzupełnione o uwagi prof. W.Schmicklera. We wszystkich czterech publikacjach zarówno kodowanie programu, wykonanie obliczenia, jak i napisanie pracy to samodzielna praca Kandydatki. Podobnie ocenia swój wkład we wspólnych pracach dr Anna Ignaczak szczegółowo omawiając swój udział w ich stworzeniu, a procentowo określając to liczbami 75%, 85%, 90% i 90%.

Niezależnie od oświadczeń mogę jako recenzent stwierdzić, że wcześniejsze prace i ich tematyka wyraźnie wskazują drogę dojrzewania naukowego dr A. Ignaczak i rozwijanie umiejętności samodzielnego stawiania problemów naukowych.

### **Dorobek dydaktyczny i organizacyjny**

Dr Anna Ignaczak prowadzi lub prowadziła wykłady, konwersatoria i laboratoria z chemii teoretycznej, chemii kwantowej, ćwiczenia z matematyki i rachunkowe dla studentów chemii oraz laboratorium z chemii ogólnej i analitycznej dla studentów biologii. Warto podkreślić bardzo wysokie oceny Jej zajęć w ankietach studenckich – średnia ocen 4,72 w skali 2 – 5.

Dwukrotnie Kandydatka była zapraszana do wygłoszenia wykładów na międzynarodowych warsztatach w Niemczech z zakresu elektrochemii i elektrokatalizy.

Na Uniwersytecie Łódzkim dr A. Ignaczak była promotorem 6 prac magisterskich i 2 licencjackich.

Niecodzienną oceną umiejętności dydaktycznych i wiedzy merytorycznej było powierzenie dr Annie Ignaczak przez prof. W.Schmicklera opieki nad Grupą Teoretyczną na Uniwersytecie w Ulm w czasie Jego półrocznego wyjazdu do Włoch i nadzorowanie 5 prac doktorskich oraz opieka nad pracą dyplomową. Parę lat później sprawowała opiekę nad kolejną pracą doktorską, co zaowocowało wspólną publikacją. Potwierdza to w osobnym oświadczeniu prof. W. Schmickler.

Dr Anna Ignaczak wykazała się dużą umiejętnością zdobywania funduszy na dłuższe lub krótsze wyjazdy do ośrodków, z którymi współpracowała w Portugalii i Niemczech – łącznie 12 wyjazdów. Uzyskała na wyjazdy 6 różnych grantów, a część z wyjazdów była finansowana w ramach 2 projektów Unii Europejskiej.

Wyniki swoich prac przedstawiała na konferencjach między narodowych i krajowych: 8 posterów i 3 wystąpienia ustne.

Jak dotychczas dr Anna Ignaczak nie uzyskała grantów krajowych, poza 3 wewnętrznymi grantami Uniwersytetu Łódzkiego na badania własne.

### **Podsumowanie**

Cykl siedmiu prac zgłoszonych do postępowania habilitacyjnego wyraźnie udowadnia zdolność dr Anny Ignaczak do samodzielnego rozwiązywania problemów naukowych. Korzystając z wcześniej powstałych teorii i modeli badawczych potrafiła je twórczo rozwinąć i zastosować do nowych zagadnień.

Reasumując powyższą ocenę dorobku naukowego dr Anny Ignaczak ze szczególnym uwzględnieniem rozprawy habilitacyjnej, a także biorąc pod uwagę osiągnięcia dydaktyczne stwierdzam, że spełnia Ona wymogi stawiane kandydatom do uzyskania stopnia doktora habilitowanego i wnoszę o dopuszczenie Jej do dalszych etapów przewodu.

Prof. dr hab. Marek Kręglewski