



Prof. dr hab. Paweł J. Kulesza
Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego
Kierownik Pracowni Elektroanalizy Chemicznej
ul. Pasteura 1, 02-093 Warszawa
Tel: (22) 8220211 wew. 218, 289 lub 391
Fax: (22) 8225996
E-mail: pkulesza@chem.uw.edu.pl

29 marca 2012 r.

**RECENZJA DOROBKU NAUKOWEGO I DYDAKTYCZNEGO PANI DR ANNY
IGNACZAK W ZWIĄZKU Z POSTĘPOWANIEM O NADANIE STOPNIA
NAUKOWEGO DOKTORA HABILITOWANEGO**

Pani dr Anna Ignaczak ukończyła studia magisterskie z wyróżnieniem na Wydziale Matematyki, Fizyki i Chemii Uniwersytetu Łódzkiego w 1989 roku. Następnie podjęła studia doktoranckie na Uniwersytecie w Porto w Portugalii. W 1993 roku obroniła pracę doktorską (której promotorami byli prof. dr hab. Jose A. N. Ferreira Gomes z Uniwersytetu w Porto i prof. dr hab. Stanisław Romanowski z Uniwersytetu Łódzkiego) na temat specyficznej adsorpcji jonów halogenkowych na metalach szlachetnych w ujęciu teoretycznym. Od 1989 roku jest zatrudniona w Katedrze Chemii Teoretycznej i Strukturalnej Wydziału Chemii Uniwersytetu Łódzkiego, obecnie na stanowisku starszego wykładowcy.

Pani dr Anna Ignaczak ma znaczny dorobek naukowy. Jej zainteresowania naukowe dotyczyły początkowo badania wpływu efektów fononowych na mechanizm chemisorpcji tlenu na monokryształach glinu. W trakcie pobytu w Portugalii zajmowała się w pierwszej kolejności wykonaniem obliczeń kwantowo-chemicznych dla oddziaływania jonu niklu z cząsteczką wody, a następnie - w ramach pracy doktorskiej - badaniami zjawisk elektrochemicznych obejmujących adsorpcję cząsteczek i jonów na granicy faz metal-roztwór z wykorzystaniem metod teoretycznych, w tym obliczeń kwantowo-mechanicznych oraz symulacji komputerowych. Prace te były potem kontynuowane w kierunku badań oddziaływań jonów halogenkowych z metalem, na przykład klastery miedzi o różnej wielkości czy z powierzchnią złota lub srebra, wskazujących na istotne znaczenie wpływu rozpuszczalnika oraz silne przeniesienia ładunku z jonu do metalu. Później Pani dr Anna Ignaczak zajmowała się problematyką oddziaływań cząsteczek wody zarówno z powierzchnią metalu jak i jonami halogenkowymi. Prowadziła także równoległe obliczenia kwantowo-chemiczne dla oddziaływań kationów metali alkalicznych z takimi metalami jak miedź, srebro czy złoto i

stwierdziła, że siła oddziaływań tych kationów w próżni maleje wraz ze wzrostem promienia jonu. Badania te były poparte stwierdzeniem znacznych oddziaływań elektrostatycznych jonów zaadsorbowanych z ładunkami zlokalizowanymi na atomach metalu (np. miedzi) w jego klastrze. Jest współautorem rozdziału w książce *Metal clusters in chemistry*.

Dalsze prace Pani dr Ignaczak dotyczyły opisu kwantowo-chemicznego zmian energii związanych z modyfikacją struktury cząsteczki podczas utleniania i redukcji wynikającą z rozerwania lub rozciągania wiązania wewnątrzcząsteczkowego. Badania były prowadzone początkowo we współpracy z wybitnym specjalistą w zakresie elektrochemii teoretycznej prof. Wolfgangiem Schmicklerem z Uniwersytetu w Ulm w Niemczech gdzie Pani Ignaczak odbyła w latach 2001 - 2002 szesnastomiesięczny staż podoktorski. Później (w 2009 roku) badania nad redukcją bromku tert-butyłu były kontynuowane w ramach grantu indywidualnego będącego częścią projektu HPC-Europa2 finansowanego przez Unię Europejską. Znaczna część uzyskanych wyników została wykorzystana przez Panią Ignaczak do przygotowania cyklu publikacji wraz z opisem zgłoszonym do postępowania habilitacyjnego.

Za bardzo użyteczne uważam również badania przeprowadzone później we współpracy z prof. W. Schmicklerem w ramach międzynarodowego projektu Unii Europejskiej *Nanostructures for Energy and Chemicals Production* („NENA”). Dotyczyły one bardzo ważnego zagadnienia naukowego i technologicznego – redukcji tlenu. Wkład Pani Ignaczak dotyczył badań nad efektami kwantowymi w procesie elektroredukcji tlenu, a konkretnie obliczeń kwantowo-chemicznych dla cząsteczki O_2 i częściowo zredukowanej O_2^- . Badania te doprowadziły do wyznaczenia wartości własnych i funkcji falowych poszczególnych stanów wibracyjnych obydwu form, O_2 i O_2^- , pomiędzy którymi przeniesienie elektronu jest zwykle uważane za czynnik limitujący szybkość całego procesu redukcji tlenu.

Późniejsze badania Pani dr Anny Ignaczak dotyczyły bardzo ważnego problemu chemii środowiska, jakimi są badania właściwości fizykochemicznych toksycznych i rakotwórczych halogenopochodnych węglowodorów oraz rodników powstających w czasie ich redukcji. Pani Ignaczak dokonała analizy wpływu zastosowanej metody kwantowo-chemicznej na określenie takich parametrów jak struktura, energia wiązań czy powinowactwo elektronowe. Celem nadrzędnym tych badań było wyselekcjonowanie metod, które dawałyby najlepsze wyniki weryfikowalne eksperymentalnie, przykładowo w kontekście wyznaczenia długości wiązań i energii aktywacji ich rozerwania. Powyższa problematyka była przedmiotem trzech prac magisterskich kierowanych przez Panią Ignaczak.

Ostatnio przedmiotem zainteresowania Pani dr Anny Ignaczak są systematyczne badania rodnikowych produktów redukcji halogenopochodnych węglowodorów zmierzające do wyznaczenia wybranych parametrów strukturalnych i określenia stabilizacji energetycznej przykładowo dla kationu *tert*-butylowego i jego rodnika. W rezultacie możliwe było oszacowanie potencjału jonizacji oraz wysokości bariery energetycznej dla inwersji zachodzącej w rodniku. W przyszłości Pani Ignaczak zamierza kontynuować badania kinetyczne i mechanistyczne elektrochemicznej redukcji halogenowęglowodorów.

Pani dr Anna Ignaczak jest autorem 23 prac naukowych opublikowanych w czasopismach o zasięgu międzynarodowym (o całkowitym współczynniku oddziaływania przekraczającym 50), w tym 7 artykułów należących do jednotematycznego cyklu publikacji stanowiącego osiągnięcie naukowe zgłoszone do postępowania habilitacyjnego. Jej publikacje są z pogranicza takich dziedzin chemii jak chemia fizyczna, chemia teoretyczna i elektrochemia. Wyniki Jej badań znalazły uznanie wśród badaczy zajmujących się tą dziedziną (liczba cytowań wynosi około 300, a tak zwany indeks Hirscha jest równy 9). Ważną cechą Jej badań naukowych jest kompleksowe podejście do badań teoretycznych zmierzających do lepszego zrozumienia kinetyki oraz mechanizmów procesów elektrochemicznych, w których dochodzi do osłabienia lub rozerwania wiązania wewnątrzcząsteczkowego.

Jednotematyczny cykl publikacji zgłoszony przez Panią dr Ignaczak jako osiągnięcie naukowe do postępowania habilitacyjnego opisuje badania teoretyczne wpływu drgań wewnątrzcząsteczkowych na kinetykę oraz mechanizm elektrochemicznej redukcji, ze szczególnym uwzględnieniem reakcji, w których następuje rozerwanie wiązania. Rozważania autorki oparte na wynikach badań własnych opublikowanych w siedmiu oryginalnych pracach naukowych wydanych w znanych czasopismach międzynarodowych z dziedziny elektrochemii (*Electrochimica Acta* czy *Journal of Electroanalytical Chemistry*) i fizyki chemicznej (*Chemical Physics*). Pani dr Ignaczak odwołuje się również do wyników badań własnych zawartych w swoich innych publikacjach. Tematyka załączonego cyklu publikacji dotyczy ciekawej i ważnej problematyki z pogranicza klasycznej elektrochemii i chemii teoretycznej, a konkretnie badań mechanizmów i kinetyki reakcji redukcji związków chemicznych na granicy faz metal-roztwór z wykorzystaniem rozszerzonego modelu Hamiltonianu oraz metody symulacyjnej do analizy wpływu zmian struktury cząsteczki redukowanej elektrochemicznie oraz parametrów, takich jak lepkość rozpuszczalnika, siła oddziaływania z elektrodą, potencjał elektrody czy temperatura. Na wybranych przykładach

własnych osiągnięć Autorka w sposób systematyczny dokonuje porównawczej analizy procesów adiabatycznych i nieadiabatycznych, gdzie zbadany został wpływ zmian wewnątrzcząsteczkowych oraz wybranych warunków reakcji. Celem nadrzędnym wydaje się być lepsze zrozumienie mechanizmów złożonych procesów elektrodowych przebiegających pomiędzy układami chemicznymi często o bardzo odmiennych właściwościach.

Po zapoznaniu się z załączonym zestawem kopii publikacji naukowych chciałbym zwrócić uwagę na ich wysoką jakość zarówno merytoryczną jak i edytorską świadcząca o dojrzałości naukowej Pani dr Anny Ignaczak. W moim odczuciu na szczególne wyróżnienie zasługuje samodzielna praca teoretyczna habilitantki poświęcona porównaniu wpływu efektów temperaturowych na elektroredukcję chlorku i bromku tert-butylu (*Electrochimica Acta*, **2011**, 56, 6305-6311), a także pozycja (*Electrochimica Acta*, **2008**, 53, 2619-2629) wskazująca na znaczenie istnienia dwóch różnych mechanizmów: adiabatycznego – kiedy oddziaływanie pomiędzy reagentem i elektrodą jest silne, i nieadiabatycznego – kiedy takie oddziaływanie jest słabe. Pani Ignaczak uczestniczyła w licznych konferencjach międzynarodowych i krajowych, gdzie miała wystąpienia posterowe, a także była dwukrotnie zapraszana do wygłoszenia wykładów na międzynarodowych warsztatach specjalistycznych poświęconych elektrokatalizie i chemii powierzchni.

Z całą pewnością należy stwierdzić, iż osiągnięcia naukowe Pani dr Ignaczak są znaczące. Recenzent jest świadomy faktu, że dokonanie szczegółowego opisu teoretycznego zjawisk międzyfazowych, a także przeprowadzenia szerokiej dyskusji właściwości elektrochemicznych badanych układów wymagało dobrej znajomości chemii fizycznej powierzchni, elektrochemii oraz chemii kwantowej oraz ostrożnej interpretacji wyników. Habilitantka podjęła się trudnego zadania i wywiązała się z niego dobrze. Jednotematyczny cykl publikacji zawiera istotne elementy nowości naukowej, prezentuje wyniki uzyskane różnymi kwantowo-chemicznymi metodami obliczeniowymi, a uzyskane rezultaty uzupełniają się, co pozwala wyciągnąć odpowiednie wnioski. Na podstawie otrzymanych materiałów do oceny zawierających oświadczenia podpisane przez współautorów prac składających się jednotematyczny cykl publikacji, można określić Panią dr Annę Ignaczak jako głównego autora i wykonawcę opisywanych badań. Ponadto habilitantka zachęcała skutecznie do swojej tematyki badawczej młodych pełnych zapału pracowników nauki – magistrantów, a nawet doktorantów. Do chwili obecnej wypromowała sześciu magistrów.

Z dostarczonych materiałów wynika, że Pani dr Anna Ignaczak jest doświadczonym nauczycielem akademickim. Prowadziła wykład i seminaria z chemii teoretycznej, ćwiczenia z chemii kwantowej i zajęcia laboratoryjne z chemii ogólnej i analitycznej dla studentów na kierunkach *chemia* i *biologia* w Uniwersytecie Łódzkim. Powyższe dane świadczą o bardzo dużej aktywności naukowo-dydaktycznej Pani Ignaczak. Ponadto można spodziewać się na podstawie wyników ankiet studenckich, że Jej działalność dydaktyczna znajduje wysokie uznanie wśród studentów i pracowników.

W związku ze wszczętym przez Radę Wydziału Chemii Uniwersytetu Łódzkiego postępowaniem o nadanie Pani dr Annie Ignaczak stopnia naukowego doktora habilitowanego nauk chemicznych chciałbym pokreślić, że w moim odczuciu, Jej jednoznacznie samodzielne osiągnięcia naukowe, jak i też istotny dorobek dydaktyczny (w tym w zakresie kształcenia studentów na poziomie magisterskim) spełniają wymogi stawiane przez Ustawę o Stopniach i Tytule Naukowym i uzasadniają wniosek o nadanie Jej tego stopnia naukowego.



prof. dr hab. Paweł Kulesza
profesor zwyczajny UW