



Poznań, dnia 4 listopada 2021 roku

RECENZJA

**w związku z wnioskiem w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego
w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne
złożonym przez
Pana dra Przemysława Kolko**

Podstawą wykonania recenzji jest decyzja Rady Doskonałości Naukowej z dnia 26 kwietnia 2021 r. o wyznaczeniu części składu komisji habilitacyjnej w postępowaniu w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego dr. Przemysławowi Kolkowi (Uniwersytet Rzeszowski) w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne z moją osobą wskazaną jako recenzent. O decyzji RDN poinformowała mnie mailem Pani dr. hab. Joanna Rode – sekretarz ustanowionej komisji habilitacyjnej. Dokumentację wraz prośbą o wykonanie recenzji przekazała mi Pani dr. hab. Joanna Rode.

Dokumentacja dołączona do wniosku zawiera; m.in. kopię wniosku wraz z załącznikami w postaci plików/folderów zatytułowanych odpowiednio do ich zawartości m.in. autoreferat, dane wnioskodawcy, zestawienie publikacji z odpowiednim podziałem na cykl publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe stanowiącego podstawę o ubieganie się o nadanie stopnia doktora habilitowanego oraz inne publikacje, wszystko poparte analizą scientometryczną, kopię dyplomu doktorskiego. Autor wniosku ponadto udostępnił inne dokumenty mogące mieć znaczenie przy dokonanej ocenie wniosku, m.in. oświadczenia współautorów i własne. Informacje o zrealizowanych stażach czy grantach. Na moją prośbę, wszystkie te dokumenty dostarczono mi wyłącznie w formie elektronicznej.

Pan dr Przemysław Kolek ukończył studia w roku 1997 na Uniwersytecie Jagiellońskim. Pracę doktorską pt. “Widma elektronowo-oscyłacyjne schłodzonych cząsteczek cyjanowych pochodnych aniliny” Habilitant obronił w roku 2003 również na Uniwersytecie Jagiellońskim na Wydziale Chemii. Promotorem pracy magisterskiej i doktorskiej był prof. dr. hab. Jan

Najbar. Kopia dyplomu doktorskiego znajduje się w dokumentacji przedłożonego wniosku. Historia zatrudnienia to kolejno 01.10.1997 – 30.09.1998, staż asystencki na Uniwersytecie Jagiellońskim na Wydziale Chemii, 01.10.1998 – 28.02.2003 studia doktoranckie na Uniwersytecie Jagiellońskim na Wydziale Chemii, pobyt zagraniczny w okresie 17.03.2003 – 31.07.2005 kontrakt postdoktorancki na Uniwersytecie w Bazylei (Szwajcaria), w Instytucie Chemii Fizycznej w Grupie Astrochemii pod kierunkiem prof. dr Johna P. Maiera. Po powrocie do kraju 01.10.2005 – 30.09.2009 zatrudnienie na stanowisku asystenta na Uniwersytecie Jagiellońskim, na Wydziale Chemii i ostatecznie 01.10.2006 do chwili obecnej zatrudnienie na stanowisku adiunkta na Uniwersytecie Rzeszowskim, początkowo w Instytucie Fizyki na Wydziale Matematyczno-Przyrodniczym, a od 01.10.2019 w Kolegium Nauk Przyrodniczych, w Instytucie Nauk Fizycznych, a od 01.10.2018 na stanowisku starszego wykładowcy/adiunkta w grupie dydaktycznej.

Okresy zatrudnienia uzupełniają inne krótkoterminowe staż zagraniczne i krajowe, m.in. na Uniwersytecie w Bazylei (Szwajcaria), Université Paris-Est Marne la Vallée, (Paryż, Francja), Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk (Warszawa), Uniwersytecie Jagiellońskim, na Wydziale Chemii, (Kraków).

Recenzji dokonałem w szczególności kierując się Art. 221 ust. 8 i Art. 219 ust 1 pkt. 2. ustawy *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* z dnia 20 lipca 2018. Kierowałem się również treścią umowy Nr zlec. 090-087 zawartej w celu wykonania recenzji pomiędzy Instytutem Chemii i Techniki Jądrowej a moją osobą. W recenzji zawarłem również opinię o wniosku bazując na własnym doświadczeniu, ale też odwołując się do uniwersalnych zasad zwyczaju i tradycji akademickiej.

Osiągnięcie naukowe zatytułowane przez Habilitanta jako „*Od widm laserowo indukowanej fluorescencji, do geometrii i dynamiki wzbudzonych cząsteczek: badania cząsteczek kwasu antranilowego schłodzonych w naddźwiękowej więzce molekularnej*” składa się z cyklu siedmiu prac H1-H7.

H1. K. Pirowska, P. Kolek, J. Goclon, J. Najbar* "Geometry changes upon $S_0 \rightarrow S_1$ electronic excitation of aniline derivatives" *CHEMICAL PHYSICS LETTERS*, Vol. 387 (2004) 165-175.

H2. P. Kolek*, S. Leśniewski, K. Pirowska, J. Najbar „LIF excitation spectra for $S_0 \rightarrow S_1$ transition of anthranilic acid: Detailed studies” *Journal of Molecular Spectroscopy*, Vol. 249 (2008) 100–112.

- H3.** S. Leśniewski, P. Kolek*, K. Pirowska, A. L. Sobolewski, J. Najbar „Franck–Condon analysis of laser-induced fluorescence excitation spectrum of anthranilic acid: Evaluation of geometry change upon $S_0 \rightarrow S_1$ excitation” *Journal of Chemical Physics*, Vol. 130, (2009) 054307-1–054307-14.
- H4.** P. Kolek*, S. Leśniewski, M. Andrzejak, M. Góra, P. Cias, A. Węgrzynowicz, J. Najbar, „LIF excitation spectra for $S_0 \rightarrow S_1$ transition of deuterated anthranilic acid COOD, ND₂ in supersonic-jet expansion”, *Journal of Molecular Spectroscopy*, Vol. 264 (2010) 129–136.
- H5.** P. Kolek*, M. Andrzejak, J. Najbar, M. Ostrowska-Kopeć, I. Piotrowska, “Isotopic effects in the S_1 excited state of anthranilic acid deuterated in various positions in substituent groups. Supersonic-jet LIF spectroscopy and CC2 ab initio study” *Chemical Physics*, Vol. 450 (2015) 46-58.
- H6.** P. Kolek*, M. Andrzejak, R. Hakalla, W. Szajna, “Quantitatively adequate calculations of the H-chelate ring distortion upon the in the S_0 - $S_1(\pi\pi^*)$ excitation in internally H-bonded o-anthranilic acid: CC2 coupled cluster versus TDDFT” *Journal of Physical Chemistry A*, Vol. 122 (2018) 6243-6255.
- H7.** P. Kolek*, M. Andrzejak, T. Uchacz, P. Szlachcic “Consistent Franck-Condon modeling of geometry changes for the $S_0 \rightarrow S_1(\pi\pi^*)$ excitation in anthranilic acid: LIF spectroscopy aided by CC2 or TDDFT vibrations.” *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, Vol. 242 (2020), 106747 (pgs. 1-16).

W sześciu z tych publikacji dra Przemysław Kolko jest wskazany jako autor do korespondencji, a w pięciu publikacjach jest pierwszym autorem. W publikacji H3 Habilitant jest wskazany jako drugi autor, ale jednocześnie jest wskazany jako autor do korespondencji. Jak z tego prostego omówienia wynika, popartego oświadczeniami Habilitanta i współautorów nie mam wątpliwości, że rola dra Przemysława Kolko w powstaniu zaprezentowanego cyklu prac była dominująca. Wszystkie publikacje przedstawione w cyklu H1-H7 ukazały się w recenzowanych czasopismach naukowych o obiegu międzynarodowym, z dobrymi wskaźnikami wpływu. Wszystkie publikacje ukazały się w czasopismach ujętych w wykazie sporządzonym zgodnie z przepisami ustawy *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce*.

Osiągnięcie naukowe „*Od widm laserowo indukowanej fluorescencji, do geometrii i dynamiki wzbudzonych cząsteczek: badania cząsteczek kwasu antranilowego schłodzonych w naddźwiękowej wiązce molekularnej*” składa się z cyklu siedmiu prac. Tematyka prac H1-H7 zawiera się w tak sformułowanym tytule osiągnięcia naukowego, jednak sam tytuł jest zbyt ogólny. Swego rodzaju korekta i uszczegółowienie tematu następują w jasno i dobrze zdefiniowanym przedstawieniu celu cyklu jednotematycznych publikacji. Jak pisze

dr Przemysław Kolko „Celem pracy było badanie geometrii i dynamiki cząsteczki kwasu antranilowego (orto-aminobenzoesowego) w pierwszym singletowym stanie wzbudzonym $S_1(\pi \rightarrow \pi^*)$ i ilościowe wyznaczenie zmian geometrii równowagowej spowodowanych wzbudzeniem, w oparciu o wyniki doświadczalne. W szczególności, wyznaczenie zmian związanych ze znacznym wzmocnieniem wewnątrzcząsteczkowego wiązania wodorowego $N-H \cdots O$ na skutek wzbudzenia, oraz deformacji tworzących je podstawników.”

Praca H1 obejmuje modelowania czynników Francka-Condon w modelu wielowymiarowym, dyskutowanych na podstawie wyników obliczeń kwantowo-chemicznych ab initio dla przejść $S_0 \rightarrow S_1(\pi-\pi^*)$ w kwasie antranilowym, oprócz tego przeprowadzono analogiczne modelowania dla antranilanu metylu, kwasu salicylowego, oraz cyjanowych (nitrylowych) pochodnych aniliny. Przeprowadzono dyskusję zastosowania metod HF i CIS w celu przetestowania trafności przewidywań tych metod w odniesieniu do badanej grupy cząsteczek.

Ciekawym wynikiem zaprezentowanym w pracy H2 było zidentyfikowanie pasm elektronowo-oscylacyjnych należących do nakładających się spektralnie przejść elektronowych monomeru oraz dimeru kwasu antranilowego. Na podkreślenie zasługuje taki dobór warunków pomiarowych, że udało się zaobserwować narastanie systematycznych różnic intensywności pasm monomeru i dimeru. Ważnym osiągnięciem przedstawionym w tej pracy było przedstawienie szerokości spektralnej profili rotacyjnych zredukowanej do około $1.5-1.7 \text{ cm}^{-1}$ dla większości pasm, czyli do wartości około 2-3-krotnie mniejszej, niż we wcześniej publikowanych widmach.

W pracy H3, w mojej opinii stanowiącej naważniejsze osiągnięcie naukowe Habilitanta, przedyskutowano w jakim stopniu dopasowanie wartości czynników FC w oparciu o dane doświadczalne, skoryguje niedoskonałości obliczeń zmian geometrii i drgań normalnych.

Ciekawym i wartym uznania wątkiem rozwiniętym w autoreferacie jest ten przedstawiający drogę rozwoju Habilitanta „Początkowo (w pracy [H3]) wykorzystałem wyniki obliczeń TD-DFT(B3LYP) wykonane przez prof. Andrzeja Sobolewskiego, następnie w pracy [H4] użyłem wyniki obliczeń wykonanych przez dr hab. Marcina Andrzejaka, za pomocą programu Turbomole. Dzięki postępom programów obliczeniowych i technologii komputerowych, które znacznie poprawiły dostępność tej metody, w późniejszych pracach [H5-H7], obliczenia TD-DFT wykonałem samodzielnie za pomocą programu Gaussian.”

W pracach H5-H7 obliczenia wykonane przez dra Przemysław Kolko metodą CC2 za pomocą programu Turbomole, wykorzystywały bazy funkcyjne (aug-cc-pVDZ, cc-pVTZ i aug-cc-pVTZ), natomiast obliczenia w największej bazie cc-pVQZ wykonał dr Marcin Andrzejak.

Do osiągnięć niewątpliwie można zaliczyć, m.in:

Przedstawienie widm laserowo indukowanej fluorescencji cząsteczek kwasu antranilowego oraz jego izotopomerów, schłodzonych do temperatur kriogenicznych w warunkach naddźwiękowej wiązki molekularnej.

Rozróżnienie pasm wibronowych należących do nałożonych spektralnie widm przejść $S_0 \rightarrow S_1$ monomeru i dimeru kwasu antranilowego.

Uzyskanie spójnych ilościowo modelowań czynników FC i oszacowań zmian geometrii równowagowej na skutek wzbudzenia, na podstawie doświadczalnych intensywności pasm w widmach laserowo indukowanej fluorescencji, oraz drgań normalnych obliczonych metodami chemii kwantowej.

Zestaw prac przedstawionych jako osiągnięcie habilitacyjne był cytowany w sumie 46 razy, a średni współczynnik wpływu dla prac z cyklu H1-H7 wynosi $IF=2.32$. Osiągnięcie naukowe składa się z cyklu spójnych publikacji. Habilitant opanował unikatowe metody eksperymentalne i bardzo zręcznie połączył je z zaawansowanymi teoriami chemii obliczeniowej, a przedstawiona w pracach analiza wyników i ich dyskusja wskazują na umiejętność krytycznej interpretacji uzyskanych wyników.

Osiągnięcie naukowe, zatytułowane przez Habilitanta jako „*Od widm laserowo indukowanej fluorescencji, do geometrii i dynamiki wzbudzonych cząsteczek: badania cząsteczek kwasu antranilowego schłodzonych w naddźwiękowej wiązce molekularnej*” stanowi, w rozumieniu Art. 219 ust 1 pkt. 2. ustawy *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* z dnia 20 lipca 2018, znaczny wkład w rozwój dyscypliny nauk chemicznych. W mojej opinii osiągnięcie naukowe spełnia wymagania stawiane rozprawom habilitacyjnym i może stanowić podstawę do ubiegania się o stopień naukowy doktora habilitowanego.

Charakterystyka istotnej aktywności naukowej - pozostałego dorobku naukowego

Jak wynika z dostarczonych informacji dr Przemysław Kolko jest autorem 25 publikacji naukowych znajdujących się w bazie Scopus. Oceniając pozostały dorobek naukowy Habilitanta należy stwierdzić, że jest on znaczny i istotny. Ważnym elementem osiągnięć

Habilitanta jest niewątpliwie modernizacja aparatury do pomiarów widm laserowo indukowanej fluorescencji w naddźwiękowej wiązce molekularnej znajdującej się w Zakładzie Chemii Fizycznej i Elektrochemii na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego. Inne może nawet ważniejsze osiągnięcie naukowe to projekt, budowa i uruchomienie aparatury do badań widm wzbudzenia laserowo indukowanej fluorescencji, oraz widm spektralnie rozdzielonej fluorescencji z pojedynczych poziomów wibronowych fluorescencji w Kolegium Nauk Przyrodniczych Uniwersytetu Rzeszowskiego.

Prace Habilitanta były cytowane według bazy Scopus: 160 razy bez autocytowań:, a Indeks Hirscha wg bazy Scopus wynosi 10.

Wszystko to razem daje pozytywny obraz aktywności naukowej Habilitanta oraz wskazuje na doby odbiór jego prac przez innych naukowców.

Pan dr Przemysław Kolko przedstawiał wyniki swoich prac na konferencjach krajowych i zagranicznych w formie wykładów lub referatów na międzynarodowych i krajowych konferencjach tematycznych - 4, wykładów lub referatów na zaproszenie na seminariach krajowych instytucji naukowych – 4, prezentacji posterowych na międzynarodowych i krajowych konferencjach naukowych – 42. Wszystkie wskaźniki dokonań naukowych uprawniają do opinii, że Habilitant spełnia w tym zakresie wymagania zwyczajowe stawiane kandydatom do habilitacji.

Dorobek naukowy dra Przemysława Kolko zasługuje na pozytywną ocenę zarówno od strony merytorycznej jak i formalnej, stanowi widoczny i znaczący wkład w rozwój współczesnej nauki.

Lektura grantów, w których dr Przemysław Kolko jest lub był beneficjentem - 5, wskazuje, że we wszystkich tych grantach Habilitant był wykonawcą. Szkoda, że Habilitant nie wykazał się większą determinacją lub umiejętnościami w zdobyciu grantu, w którym pełniłby rolę kierownika.

W ramach działalności dydaktycznej dr Przemysław Kolko wskazuje się dużą inicjatywą i różnorodnością. Podkreślić należy autorstwo skryptów oraz materiałów dydaktycznych, prowadzenie zajęć dydaktycznych z przedmiotów związanych z chemią, chemią fizyczną oraz spektroskopią molekularną, od wykładów, ćwiczeń rachunkowych/ audytoryjnych po ćwiczenia laboratoryjne, doświadczenie w nauczaniu w języku angielskim w tym nauczaniu na kierunku Chemie na Uniwersytecie w Bazylei (Szwajcaria).

Habilitant aktywnie angażuje się w rozwój potencjału naukowo-badawczego i bazy aparaturowej aktywnie pozyskując i biorąc udział w pozyskiwaniu środków finansowanych z funduszy strukturalnych oraz funduszy społecznych UE.

Przedstawiony przez Habilitanta dorobek organizacyjny, jak i działalność dydaktyczna oraz inne aspekty brane zwyczajowo pod uwagę w ocenie wniosku habilitacyjnego są wystarczające do wyciągnięcia wniosku, że dr Przemysław Kolko jest przygotowany do samodzielnej pracy naukowej.

Podsumowanie i wnioski

Uważam, że przedstawiony mi do recenzji monotematyczny cykl siedmiu prac Pana dra Przemysława Kolko składający się na osiągnięcie naukowe „*Od widm laserowo indukowanej fluorescencji, do geometrii i dynamiki wzbudzonych cząsteczek: badania cząsteczek kwasu antranilowego schłodzonych w naddźwiękowej wiązce molekularnej*” wraz z dokumentacją przedstawiającą całokształt dorobku naukowego Habilitanta, spełnia wszystkie wymagania ustawowe i zwyczajowe określone w ustawie *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* z dnia 20 lipca 2018.

Osiągnięcie naukowe Pana dra Przemysława Kolko stanowi znaczny wkład w rozwój dyscypliny nauk chemicznych. Analiza całości przedstawionej dokumentacji pozwala stwierdzić, że Habilitant wykazuje się istotną aktywnością naukową spełniając kryteria określone w Art. 219 ust 1 ustawy *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* z dnia 20 lipca 2018 r. Ocena pozostałych elementów jego działalności pozwala uznać, że dr Przemysław Kolko jest dobrze przygotowany do samodzielnej pracy naukowej.

Składam wniosek by Komisja Habilitacyjna wystąpiła do Rady Naukowej Dyscypliny Nauki Chemiczne w Instytucie Chemii i Techniki Jądrowej o nadanie dr. Przemysławowi Kolko stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne.