

Prof. dr hab. Bolesław Kozankiewicz
Instytut Fizyki PAN,
Al. Lotników 32/46, 02-668 Warszawa

Warszawa, 20 października 2021 r.

**Ocena rozprawy habilitacyjnej i dorobku naukowego
dra Przemysława Jana Kolka.**

Tytuł osiągnięcia:

Od widm laserowo indukowanej fluorescencji, do geometrii i dynamiki wzbudzonych cząsteczek: badania cząsteczek kwasu antranilowego schłodzonych w naddźwiękowej wiązce molekularnej

Ocena dorobku naukowo-badawczego, aktywności naukowej i dydaktycznej

Dr Przemysław Kolek ukończył studia na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w roku 1997. Pracę magisterską, zatytułowaną „*Badania stanów wzbudzonych wybranych wielopodstawionych pochodnych benzenu*”, wykonał pod kierunkiem prof. dr hab. Jana Najbara. Na tym samym Uniwersytecie, 6 lat później, w ramach studiów doktoranckich, uzyskał stopień doktora. Tytuł rozprawy „*Widma elektronowo-oscylacyjne schłodzonych cząsteczek cyjanowych pochodnych aniliny*”, promotorem był prof. dr hab. Jan Najbar. Ponad dwuletni staż podoktorski odbył na Uniwersytecie w Bazylei pod kierunkiem prof. dra Johna P. Maiera. Po powrocie do kraju został przejściowo zatrudniony jako asystent na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego, a od października 2006 r. związał swoją przyszłość z Uniwersytetem Rzeszowskim, gdzie obecnie zatrudniony jest na stanowisku adiunkta.

Dr Kolek, jak na Jego wiek i lata pracy, ma dane bibliometryczne często spotykane w Polsce na podobnym etapie kariery naukowej. Na przestrzeni 21 lat (od 1999 do roku 2020) opublikował 25 prac z listy filadelfijskiej (w tym 20 po uzyskaniu stopnia doktorskiego), co oznacza średnio trochę ponad jedną pracę rocznie. Sumaryczny „*impact factor*” tych publikacji (podany przez dra Kolka) wynosi 64,8 (średnio 2,6 na pracę). Są to więc bardzo dobre czasopisma międzynarodowe publikujące prace z zakresu Jego działalności naukowej. Prace dra Kolka (na grudzień 2020 r.) cytowane były 200 razy (150 bez autocytowań), a Jego index Hirscha wynosił 10.

Działalność naukowa dra Kolka koncentruje się wokół doświadczalnych badań fluorescencji stosunkowo prostych związków organicznych schładzanych do niskich

temperatur w naddźwiękowej wiązce molekularnej a następnie szczegółowej analizy rejestrowanych widm przy pomocy różnych metod chemii kwantowej. Zauważyć należy dużą samodzielność (samowystarczalność). Dr Kolek buduje aparaturę, wskazuje tematykę i prowadzi badania doświadczalne, a następnie wykonuje obliczenia kwantowo chemiczne. Ta ostatnia działalność można uznać za dominującą w Jego działalności, a wiedzę z metod obliczeniowych aktywnie uzupełniał na stażach u specjalistów zagranicznych i krajowych.

Z uwagi na zatrudnienie na uniwersytetach, Jagiellońskim i Rzeszowskim, dr Kolek ma duże osiągnięcia w działalności dydaktycznej. Prowadził zajęcia dydaktyczne z przedmiotów związanych z chemią, chemią fizyczną oraz spektroskopią molekularną, jest autorem i współautorem skryptów dla studentów. Na wyróżnienie zasługuje zorganizowanie i następnie kierowanie Pracownią Fizykochemii i Modelowania Molekularnego na Uniwersytecie Rzeszowskim.

Podsumowując, dorobek naukowy i dydaktyczny dra Kolka jest znaczący jak na obecny etap Jego kariery naukowej i w pełni upoważnia Go do starania się o przyznanie stopnia naukowego doktora habilitowanego.

Ocena osiągnięcia naukowego w oparciu o które trwa postępowanie habilitacyjne

Ze zbioru prac prowadzonych na przestrzeni 16 lat dr Kolek wybrał 7 powiązanych tematycznie artykułów naukowych (oznaczonych w autoreferacie jako H1 – H7), które zgłosił jako osiągnięcie naukowe pozwalające Mu ubiegać się o stopień naukowy doktora habilitowanego. W pięciu z tych publikacji jest pierwszym autorem. Z załączonych oświadczeń współautorów można wywnioskować istotny, dominujący wkład dra Kolka w powstanie tych publikacji. Brak oświadczenia prof. dra hab. Jana Najbara, współautora 5 z wybranych prac, jest konsekwencją śmierci Profesora w styczniu 2018 r. Należy tutaj zaznaczyć, że Profesor Najbar był autorem korespondującym jedynie w pierwszej z wybranych prac, z roku 2014, w pozostałych 6 pracach autorem korespondującym był dr Kolek. Wybrane przez dra Kolka prace połączone zostały wspólnym tytułem: „*Od widm laserowo indukowanej fluorescencji, do geometrii i dynamiki wzbudzonych cząsteczek: badania cząsteczek kwasu antranilowego schłodzonych w naddźwiękowej wiązce molekularnej*”. Dr Kolek przedłożył obszerny autoreferat w którym wskazał cel i znaczenie prowadzonych przez Niego badań, opisał stosowane metody doświadczalne i następnie dokonał przeglądu uzyskanych wyników z odnośnikami do prac zgłoszonych jako osiągnięcie naukowe.

Kwas antranilinowy jest dogodnym modelowym układem do spektroskopowych badań wiązania wodorowego, które ulega skróceniu po przejściu do najniższego wzbudzonego stanu singletowego S_1 . W następstwie wzbudzenia do stanu S_1 cała struktura cząsteczki kwasu relaksuje również do nowej geometrii, a szczegółową informację o zmianach strukturalnych uzyskać można analizując widmo laserowo indukowanego wzbudzenia fluorescencji (LIF). Optymalne warunki do rejestracji widm, z dobrze spektralnie rozdzielonymi, wąskimi liniami

wibronowymi, dostarcza technika schładzania (i izolowania) cząsteczek w naddźwiękowej wiązce molekularnej. Dr Kolek zaczął używać tej techniki już na początku Jego pracy na Uniwersytecie Jagiellońskim, i korzysta z niej do chwili obecnej, po uruchomieniu odpowiedniej aparatury na Uniwersytecie Rzeszowskim. Poprawiając warunki doświadczalne udało się Mu znacząco poszerzyć zasób danych spektroskopowych. W konsekwencji, w stosunku do wcześniejszych prac, poprawione zostały możliwości interpretacyjne. Istotnym postępowaniem była możliwość doświadczalnego rozseparowania, odróżnienia pasm które należy przyporządkować do monomeru albo do dimeru. Uzyskano to porównując widma wzbudzenia fluorescencji zarejestrowane przy różnych temperaturach piecyka, a więc różnej prężności par badanego związku w ekspandującej wiązce molekularnej. Bogate widmo, z wąskimi liniami przejść, umożliwiło szczegółową analizę w oparciu o zaawansowane techniki chemii kwantowej, przy czym analiza ta dotyczyła nie tylko częstotliwości rejestrowanych linii wibronowych ale i ich natężenia (w oparciu o obliczane czynniki Francka-Condon, FC). Identyfikacja pasm przypisanych do progresji nadtonów pozwoliła na analizę anharmoniczności dla dominujących w widmie drgań. Ważnym rozszerzeniem badań była analiza efektu deuterowania. Efekt ten dotyczył wymiany wodoru, H, na deuter, D, w aktywnych w wiązaniu wodorowym grupach NH_2 i COOH . Przeprowadzona analiza porównawcza umożliwiła rozdzielenie widm dla wszystkich 8-miu możliwych izotopomerów, wyznaczono położenia ich przejść (0,0) oraz częstotliwości aktywnych drgań.

Najważniejszym wkładem dra Kolka do badań, zajmującą Mu najwięcej czasu, były staranne obliczenia kwantowo-chemiczne, pozwalające na prawidłową interpretację uzyskanych wyników doświadczalnych. Dr Kolek stosował różne metody obliczeniowe, takie jak DFT(B3LYP), TD-DFT(B3LYP), i bardziej zaawansowaną metodę sprzężonych klasterów CC2, używając różnych baz funkcyjnych. Analizował geometrię cząsteczki w stanie podstawowym S_0 i wzbudzonym S_1 , i w oparciu o dane strukturalne obliczał częstotliwości i czynniki FC dla drgań normalnych. Ważnym krokiem było iteracyjne dopasowywanie zmian geometrii cząsteczki w obu stanach, S_0 i S_1 , tak aby przybliżyć obliczane czynniki FC do doświadczalnie zmierzonych natężeń odpowiednich pasm. Takie podejście, z wykorzystaniem drgań normalnych obliczonych przy pomocy najbardziej wiarygodnej metody CC2, pozwoliło oszacować, że w stanie wzbudzonym S_1 odległość pomiędzy aminowym atomem wodoru a atomem tlenu, tworzącymi wewnątrz-molekularne wiązanie wodorowe w strukturze cząsteczki kwasu antranilowego, skraca się o ok. 0,31 Å (z 1,91 do ok. 1,60 Å). Odpowiednio, choć w znacząco mniejszym stopniu, zmieniają się inne wiązania i kąty pomiędzy atomami kwasu.

Tak dokładna informacja o strukturze cząsteczki kwasu antranilowego była, po raz pierwszy, możliwa dzięki spełnieniu wysokich wymagań co do jakości zarejestrowanych widm wzbudzenia fluorescencji w połączeniu z zaawansowanymi metodami chemii kwantowej. Dr Kolek w obu tych zagadnieniach jest ekspertem. Jest bezsprzecznie wysokiej klasy specjalistą umiejącym samodzielnie zaproponować tematykę badawczą i umiejętnie ją od początku do końca zrealizować.

Mam tylko jedną uwagę krytyczną dotyczącą zamieszczonego w autoreferacie opisu aparatury. W rozdziale zatytułowanym „Inne Osiągnięcia” dr Kolek zamieścił opis „Modernizacji aparatury do pomiarów widm LIF”. Na rys. 24 (str. 48) podał i w tekście na stronie 51 (3 wiersz od dołu) napisał, że „Ponieważ sygnał fluorescencji ... charakteryzuje się bardzo niską intensywnością, fotopowielacz i układ elektroniczny pracują w trybie zliczania fotonów”. Nie rozumiem jak to jest możliwe, gdy dysza i laser pracują w trybie impulsowym, z repetycją kilku (10) Herców. Fotony można liczyć jedynie wtedy gdy detektor rejestruje fotony jako impulsy rozdzielone w czasie. Praktycznie, w przypadku rejestracji fluorescencji, która następuje po upływie co najwyżej kilka nanosekund od wzbudzenia, fotony zliczać można tylko wtedy gdy próbka wzbudzana jest przy pomocy źródła światła ciągłego o niskim natężeniu. W przypadku impulsowego, nanosekundowego wzbudzania laserowego, uwzględniając tzw. „dead time” fotopowielacza, liczyć fotony można by było jedynie z częstotliwością niższą od repetycji lasera (w rozważanym przypadku to znacząco poniżej 10 Hz). Przy tak małej liczbie rejestrowanych fotonów kłopotem byłby termiczny szum fotopowielacza. Przypuszczam, że pisząc o „zliczaniu fotonów” doszło tutaj do pomyłki językowej (lub pojęciowej). Ta drobna uwaga nie ma jednak wpływu na moją całościowo pozytywną opinię o pracy dra Kolka.

Podsumowując. W mojej ocenie całościowy dorobek naukowy dra Przemysława Kolka jak i Jego osiągnięcie naukowe przedstawione jako zbiór 7 publikacji pod wspólnym tytułem „*Od widm laserowo indukowanej fluorescencji, do geometrii i dynamiki wzbudzonych cząsteczek: badania cząsteczek kwasu antranilowego schłodzonych w naddźwiękowej wiązce molekularnej*” spełniają ustawowe (art. 219 ust. 1 pkt. 2 i 3 ustawy z 20 lipca 2018 r., Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, Dz. U. z 2018 r. poz. 1668 ze zm.) oraz zwyczajowe wymagania stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego. Dlatego wnioskuję o dopuszczenie dra Przemysława Kolka do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

