

Dr hab. Piotr Bernatowicz
Instytut Chemii Fizycznej
Polskiej Akademii Nauk
ul. Kasprzaka 44/52
01-224 Warszawa
tel. +48 22 3433410
e-mail: pbernatowicz@ichf.edu.pl

Warszawa, 26 listopada 2018 r.

**Ocena osiągnięć naukowych dra Piotra Garbacza ubiegającego się o nadanie stopnia doktora
habilitowanego w dziedzinie *nauk chemicznych* w dyscyplinie *chemia***

Podstawa prawna opracowanej recenzji: Ustawa z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki oraz rozporządzenie Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 1 września 2011 r. oraz z dnia 26 września 2016 r.

1. Informacja ogólna o Habilitancie i jego drodze naukowej

Dr Piotr Garbacz ukończył Międzywydziałowe Indywidualne Studia Matematyczno-Przyrodnicze na Uniwersytecie Warszawskim i uzyskał tytuły magistra w dziedzinach biologii (2008 r.), chemii (2008 r.), psychologii (2010 r.) i fizyki (2011 r.), a także tytuł licencjata w dziedzinie matematyki (2011 r.). W 2014 r. obronił na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego rozprawę doktorską pt. „Badania NMR magnetycznego ekranowania w gazowym wodorze i w stałych wodorkach irydu” wykonaną pod kierownictwem prof. dr hab. Karola Jackowskiego oraz prof. Rodericka Wasylshena. Po stażu podoktorskim, który odbył w Instytucie Maxa Plancka w Stuttgarcie w latach 2014-2015, został w 2016 r. adiunktem na Wydziale Chemii UW.

W 2018 r. dr Piotr Garbacz przedstawił dzieło naukowe pt. „**Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego w polu elektrycznym**” wszczynając postępowanie habilitacyjne. Dzieło to obejmuje 7 oryginalnych prac naukowych (oznaczonych w autoreferacie symbolami od H1 do H7) opublikowanych w uznanych czasopismach z tzw. listy filadelfijskiej. Habilitant jest jedynym autorem w 4 z tych prac, a w pozostałych posiada od 1 do 2 współautorów, przy czym w tych ostatnich Habilitant jest autorem korespondencyjnym i jest wskazany przez współautorów jako autor o dominującym wkładzie ocenionym na 60-75%. Wkład współautorów jest dokładnie przez nich opisany

w oświadczeniach. Sumaryczny indeks cytowań czasopism w których opublikowano prace wchodzące w skład Dzieła wynosi $IF=21.144$.

2. Ocena Dzieła

W pracach naukowych obejmujących Dzieło, Habilitant wychodząc z wcześniejszych zasadniczych spostrzeżeń prof. A.D. Buckinghama dotyczących rezonansu magnetycznego w polu elektrycznym, systematycznie przygotowuje przedpole do badań eksperymentalnych. Publikacje H1-H4 zawierają ściśle, pełne formalizmu matematycznego, rozważania teoretyczne nad tym, jakie efekty mogą zachodzić w obserwacjach metodami rezonansu magnetycznego przeprowadzanych w obecności pola elektrycznego. Praca H5 zawiera opis rezonatora szczelinowego z pętlą indukcyjną (ang. loop-gap resonator), który mógłby zostać użyty do przeprowadzenia eksperymentów przy jednoczesnej obecności w próbkach pól elektrycznego i magnetycznego. Wreszcie prace H6 i H7 zawierają wyniki obliczeń przeprowadzonych metodami chemii kwantowej, które miały na celu selekcję modeli w których przewidziane w pracach H1-H4 efekty miałyby szanse na praktyczną obserwację.

W pracy H1 Habilitant zauważył, że umieszczenie próbki w polu elektrycznym i magnetycznym powoduje powstanie dodatkowego wkładu do relaksacji poprzecznej, który nie występuje kiedy próbka znajduje się wyłącznie w polu magnetycznym. Ten dodatkowy przyczynek jest wielkością zależną od izotropowej części ekranowania magnetycznego. Z tego wynika, że dokonując pomiarów różnicowych relaksacji poprzecznej dla próbki umieszczonej jedynie w polu magnetycznym oraz próbki umieszczonej w polach magnetycznym i elektrycznym, można w sprzyjających okolicznościach (czyli wtedy, gdy duża jest część izotropowa ekranowania, a mała jego anizotropia) wyznaczyć izotropową część stałej ekranowania.

W pracy H2 Habilitant korzystając z aparatu matematycznego teorii relaksacji Wangsnessa-Blocha-Redfielda wyprowadził równania Blocha dla magnetyzacji pochodzącej od spinów połówkowych uwzględniające obecność pola elektrycznego. Przedyskutował różne warianty użycia pola elektrycznego tj. stałe i zmienne, a także oszacował wielkość możliwych do zaobserwowania efektów. Istotnym rezultatem tej pracy jest stwierdzenie, że człony indukowane w relaksacji przez zmienne pole elektryczne w sprzyjających okolicznościach mogą umożliwić wyznaczenie kątów pomiędzy elektrycznym momentem dipolowym cząsteczki a osiami głównymi tensorów ekranowania poszczególnych jąder, a to z kolei umożliwi wyznaczenie geometrii całej cząsteczki. Drugim istotnym

wynikiem tej pracy jest stwierdzenie, że równania Blocha w polu elektrycznym różnią się dla enancjomerów. Ma to doniosłe konsekwencje, gdyż czyni z metody NMR potencjalne narzędzie do bezpośredniego rozróżniania cząsteczek chiralnych. Niestety przewidywane przez Habilitanta efekty eksperymentalne są małe i wymagają użycia bardzo silnych pól elektrycznych, których generacja może nie być łatwo osiągalna w spektrometrach NMR.

W pracy H3 Habilitant wspólnie z A.D. Buckinghamem koncentruje się na efektach związanych z obecnością pola elektrycznego, które zależą od chiralności cząsteczek. Z przeprowadzonej analizy wynika, że w polu elektrycznym cząsteczki chiralne powinny dać się rozróżnić, jeśli tensory spinowo-spinowych sprzężeń skalarnych oraz tensory ekranowania posiadają dużą część antysymetryczną. Przewidywane efekty są małe tj. generowana magnetyzacja „chiralna” będzie miała intensywność 1000 razy mniejszą od „niechiralnej”, ale jest to wielkość, która powinna być możliwa do detekcji w nowoczesnych spektrometrach NMR. Natomiast generowana przez efekty chiralne polaryzacja elektryczna miałaby być wykrywana przez pomiar ładunku zebranego na okładkach kondensatora. W pracy H3 Habilitant dokonuje też wstępnej selekcji dogodnych do badań związków modelowych proponując ostatecznie organiczną nienasyconą pochodną fluorową tj. 1,3-difluorocyklopropen, w której układ kątowy między tensorem J^* ze stałą $^2J(^{13}C, ^{19}F)$ a elektrycznym momentem dipolowym analizowanej pochodnej ma własności korzystne do ewentualnej detekcji efektów chiralności.

W pracy H4 Habilitant używa aparatu matematycznego teorii relaksacji Wangsnessa-Blocha-Redfielda do analizy własności relaksacyjnych cząsteczek chiralnych umieszczonych w polu elektrycznym i magnetycznym. Analizuje poszczególne obserwable relaksacyjne i dokonuje selekcji mechanizmów relaksacji potencjalnie użytecznych, a więc takich, które w zasadzie pozwalają odróżnić cząsteczki chiralne oraz są potencjalnie możliwe do eksperymentalnej detekcji. Dyskutuje w szczególności mechanizm najbardziej obiecujący tj. interferencję pomiędzy stałą sprzężenia dipol-dipol a tensorem anizotropii przesunięcia chemicznego i proponuje schemat eksperymentu umożliwiającego detekcję efektów chiralności. Niestety przewidywany najbardziej „obiecujący” mechanizm relaksacyjny dotyczy magnetyzacji słabszej milion razy od magnetyzacji równowagowej, a zatem jego realna detekcja wydaje się wątpliwa.

W pracy H5 Habilitant rozważa konstrukcję oraz przedstawia zdjęcie prototypu rezonatora szczelinowego z pętlą indukcyjną (ang. loop-gap resonator), który miałby służyć do przeprowadzenia eksperymentów NMR w polu elektrycznym.

Prace H6 i H7 poświęcone są obliczeniom kwantowomechanicznym z użyciem metody DFT antysymetrycznych części tensorów skalarnych stałych sprzężenia spin-spin oraz ekranowania w celu wstępnej selekcji modeli, na których można by przeprowadzić eksperymenty pozwalające rozróżnić metodą NMR enancjomery w polu elektrycznym.

Wyprowadzony przez Habilitanta w pracach H1-H4 formalizm matematyczny przewidujący możliwość odróżniania enancjomerów metodą NMR w polu elektrycznym może, po eksperymentalnej weryfikacji, która jeszcze nie miała miejsca, otworzyć nową i bardzo obiecującą dziedzinę badań o dużym potencjale aplikacyjnym. Dr Garbacz w opublikowanych pracach wykazał się ponadprzeciętną innowacyjnością, zdolnością analitycznego myślenia, konsekwencją, umiejętnością sprawnego operowania zaawansowanym formalizmem matematycznym, umiejętnością przeprowadzania zaawansowanych symulacji numerycznych oraz umiejętnością kompetentnego przeprowadzania obliczeń kwantowomechanicznych z użyciem ogólnodostępnego oprogramowania. Fakt, że Habilitant jest jedynym autorem 4 prac opublikowanych w renomowanym czasopiśmie z listy filadelfijskiej świadczy o tym, że jest on ponadprzeciętnie dojrzałym, samodzielny i kompetentnym badaczem.

Podsumowując stwierdzam, że Dzieło habilitacyjne przedstawione przez dra Piotra Garbacza w formie cyklu 7 oryginalnych i spójnych tematycznie prac naukowych o wysokiej jakości spełnia z naddatkiem wymagania stawiane w przepisach związanych z postępowaniem habilitacyjnym.

3. Ocena dorobku naukowo-badawczego oraz popularyzatorsko-dydaktycznego

Habilitant, w chwili złożenia dokumentacji habilitacyjnej miał w dorobku w sumie 22 publikacje naukowe opublikowane w dobrych czasopismach z listy filadelfijskiej. 6 publikacji zostało opublikowanych przed doktoratem, a 9 (prócz dorobku stanowiącego Dzieło) po doktoracie. Prace te były cytowane 126 razy (bez autocytowań), a aktualny indeks Hirscha Habilitanta wynosi 7. Sumaryczny impact factor wszystkich prac Habilitanta wynosi 68.

Dorobek taki na pierwszy rzut oka nie jest imponujący i dopiero dokładna jego analiza zmienia taką ocenę. Aż 5 prac z wszystkich 22 opublikowanych przez Habilitanta to są prace monoautorskie! W kolejnych 5ciu pracach dr Garbacz ma tylko jednego współautora! Niezbyt wysoki indeks Hirscha jest natomiast w mojej ocenie spowodowany dwoma czynnikami:

- prace Habilitanta dotyczą trudnych pojęciowo zagadnień, zawierają zaawansowany formalizm matematyczny, a co za tym idzie są bardzo trudne w odbiorze i w związku z tym z konieczności krąg ludzi mogących je kompetentnie zacytować jest mocno ograniczony
- indeks Hirscha nadający się dość dobrze do oceny prac znajdujących się z naukowym „peletonie” nie jest miarodajny przy odróżnianiu prac pionierskich od kiepskich. Te pierwsze są nisko cytowane, bo na zupełnie nowym polu badawczym nikt jeszcze nie pracuje, a te drugie nie są cytowane bo nie zawierają treści wartej cytowania. W mojej ocenie prace dra Garbacza należą do tej pierwszej kategorii, czyli prac pionierskich.

Dr Garbacz odbył staż podoktorski w dobrym ośrodku badawczym w Niemczech. W wyniku tego stażu powstała praca H5. Kierował 1 projektem badawczym NCN SONATA, oraz brał udział jako wykonawca w 2 projektach NCN OPUS, oraz 1 projekcie MNiSW. Wygłosił 7 wykładów na konferencjach, z czego 4 na międzynarodowych i 3 na krajowych. Kieruje pracami licencjackimi i magisterskimi na Uniwersytecie Warszawskim; prowadzi zajęcia ze studentami. Widoczne jest zatem, że Habilitant intensywnie bierze udział w życiu naukowo-dydaktycznym oraz w popularyzacji nauki.

Podsumowując uważam, że ocena działalności naukowo-badawczej Habilitanta, szczególnie po doktoracie, jest ponadprzeciętna, gdyż jego pionierskie prace są publikowane w dobrych i bardzo dobrych czasopismach, a przeciętne wskaźniki bibliometryczne są (paradoksalnie!) wynikiem bardzo wysokiej jakości i pionierskości tych prac. Działalność popularyzatorsko-dydaktyczną Habilitanta również oceniam wysoko.

4. Wniosek końcowy

Zarówno osiągnięcie habilitacyjne, jak i całość dorobku naukowego, dydaktycznego i popularyzatorskiego spełniają z naddatkiem wysokie standardy dla habilitacji w trudnym obszarze magnetycznego rezonansu jądrowego oraz warunki określone w „Ustawie z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz stopniach i tytule w zakresie sztuki”. Wnoszę zatem o dopuszczenie Habilitanta do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

