



Prof. dr hab. Joanna Sadlej,  
profesor emerytowany, Wydział Chemii UW  
Warszawa, ul. Pasteura 1

26.11.2018

## RECENZJA

**rozprawy habilitacyjnej dr Piotra Garbacza**

***pt. „Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego w polu elektrycznym”***

**oraz dorobku naukowego i dydaktycznego Habilitanta**

### **I. Podstawowe dane o Habilitancie**

Pan dr Piotr Garbacz jest obecnie adiunktem na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego. Tempo kariery naukowej Habilitanta należy uznać za wzorcowe i wyjątkowo ciekawe. Tytuł magistra uzyskał w 2008 r. na Wydziale Chemii UW, zaś tytuł doktora nauk chemicznych w 2014 r. na podstawie rozprawy pt. „*Badania NMR magnetycznego ekranowania w gazowym wodorze i w stałych wodorkach irydu*”. Następnie, staż podoktorski w latach 2014-2015 odbył w bardzo dobrym ośrodku: Instytut Maxa Plancka w Stuttgarcie. Wcześniej, w ramach MPD odbywał 6 m-c staże na uniwersytecie of Western Sydney i na uniwersytecie of Alberta.

Habilitant jest współautorem 16 artykułów naukowych opublikowanych w czasopiśmie z Listy Filadelfijskiej. Siedem publikacji z tej liczby stanowią podstawą rozprawy habilitacyjnej i są zgłoszone jako osiągnięcie naukowe. Habilitant jest także współautorem jednego artykułu przeglądowego. Brał udział w wielu konferencjach międzynarodowych i krajowych, prezentując wyniki swojej pracy w postaci wystąpień ustnych i prezentacji posterów. Ponadto, został zaproszony do wygłoszenia wykładu z własnych osiągnięć w Grenoble (Lab. National des Champs Magnetiques Intenses) i w Stuttgarcie (Max Planck Institute for Intelligent Systems), co świadczy o zainteresowaniu środowiska naukowego Jego osiągnięciami. Był beneficjentem grantu SONATA 10 oraz wykonawcą w grantach OPUS 10 i OPUS 9 – NCN.

Ostatnio otrzymał prestiżowe naukowe stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego dla wybitnych młodych naukowców na okres 3 lat.

Habilitant opublikował wyniki swoich badań w bardzo dobrych i dobrych czasopismach naukowych. Świadczy to o aktualności poruszanych przez Habilitanta problemów badawczych, a równocześnie jest gwarancją, że wyniki jego badań były recenzowane przez wybitnych światowych specjalistów. Należy także wspomnieć o współpracy Habilitanta z prof. A. Buckingham, jednego z twórców współczesnej spektroskopii teoretycznej.

Po zapoznaniu się z opisem Autora o Jego udziale w powstawaniu wchodzących w skład rozprawy habilitacyjnej siedmiu publikacji stwierdzam, że *udział intelektualny i wykonawczy Habilitanta w publikacjach współautorskich, składających się na rozprawę habilitacyjną jest wiodący i spełnia wymogi formalne stawiane przez Ustawę.*

## **II. Ocena merytoryczna rozprawy habilitacyjnej**

Oceniana przeze mnie rozprawa habilitacyjna dr Garbacza reprezentuje kolejny etap realizacji badań nad praktycznymi aspektami teorii, będących podstawą spektroskopii NMR. Autor w pełni korzysta z dotychczasowych osiągnięć i doświadczeń zdobytych podczas staży podoktorskich w zespołach prof. Fischera i prof. Buckinghama, a przedstawione badania własne rozwija przede wszystkim w kierunku poznania możliwości wykorzystania metod spektroskopii NMR do nowych obszarów chemii, czyli do badania tą metodą związków chiralnych, m.in. rozróżniania enancjomerów. Obecnie, rozróżnianie enancjomerów prowadzone jest przede wszystkim przy pomocy rozdziału chromatograficznego z chiralną fazą stacjonarną. Zastosowanie to tego celu bezpośredniej metody spektroskopowej, jaką byłaby zmodyfikowana metoda NMR, byłaby bardzo korzystnym i nowatorskim rozwiązaniem.

Bardzo ważnym czynnikiem sprzyjającym rozwojowi tego typu tematyki jest możliwość praktycznego ich wykorzystywania w rozwiązywaniu wielu problemów i współpracy chemików z teoretykami. Zatem, nie ulega dla mnie wątpliwości, że temat ten jest dobrze zdefiniowany i dotyczy zagadnień związanych z bardzo ważnym problemem wykorzystania metod spektroskopowych do badania substancji chiralnych, *mieszcząc się w nurcie aktualnych naukowych tematów badawczych.*

Od dawna była oczekiwana odpowiedź na pytanie, czy możliwe jest wykorzystanie widm NMR do badania enancjomerów. Było wiadomo, że standardowa metoda pomiarów widm NMR jest nieczuła na tak subtelne właściwości jak chiralność. Jednakże, pierwsza propozycja bezpośredniego badania tego problemu pojawiła się w publikacjach Buckingham z 2004 r.

oraz Buckingham i Fischera w 2006 r. Zgodnie z wyżej wymienionymi artykułami, NMR można zastosować do rozróżniania chiralności molekuł w fazie ciekłej, gdy rejestracja widm jest prowadzona w obecności pola elektrycznego. Metoda ta uzyskała nazwę NMER (ang. Nuclear Magneto-Electric-Resonance) i teoretycznie opracowany został algorytm postępowania streszczający się w dwóch ogólnie zaproponowanych etapach:

(1) w etapie pierwszym przygotowuje się spiny wrażliwe na chiralność przy pomocy zewnętrznego statycznego pola magnetycznego wraz z dodanym zewnętrznym polem elektrycznym (RF) o wektorze  $\mathbf{E}$  prostopadłym do pola magnetycznego i wysokim natężeniu pola;

(2) w etapie drugim rejestrowane jest widmo NMR w sposób standardowy.

Tak pomyślany eksperyment zapewnia indukowanie oscylacyjnej magnetyzacji próbki  $\mathbf{M}(t)$  oraz indukowanie polaryzacji elektrycznej  $\mathbf{P}(t)$  z częstością Larmora. Zrealizowanie doświadczalne takich pomiarów wymaga starannej teoretycznej analizy wszystkich czynników, zarówno od strony aparaturowej jak i właściwości, które spełniać muszą badane molekuły. Nie dziwi zatem, że siedem publikacji, jakie dr Garbacz przedstawił jako osiągnięcie na stopień doktora habilitowanego, zawiera dwa główne tory rozwoju metody NMER:

- (1) obliczenia kwantowe dla wielu molekuł chiralnych i ich dyskusja pod kątem odpowiednich właściwości wymaganych do diskutowanych pomiarów, oraz
- (2) realizacja wielu elementów aparatury, np. parametry rezonatorów.

Jestem pod dużym wrażeniem rozmachu zagadnień, jakimi zajmował się Habilitant i jak w harmonijny, a zarazem przejrzysty sposób skomponował i opisał swoje osiągnięcia o tak szerokim wachlarzu problemów, kierując się hasłem: udowodnić jeszcze raz, jak szerokie są potencjalne możliwości zastosowań metody NMR.

W siedmiu zaprezentowanych publikacjach Autor przedstawił schemat, którego zadaniem jest przystosowanie widm NMR do badań chiralności molekuł poprzez uwzględnienie w hamiltonianie członów nieparzystych względem inwersji operatora pola elektrycznego. Artykuły, oznaczone przez Autora symbolami H1 do H4 oraz H6 i H7 są opublikowane wszystkie w czasopismach z najwyższej półki. Bazują one na teoretycznych rozważaniach dotyczących szeregu przewidzianych nowych efektów widm NMR w polu elektrycznym. Ponadto, oszacowane zostały wielkości omawianych efektów, zaproponowano molekuły i opisano wyniki obliczeń kwantowo-chemicznych dla tych związków. W publikacji oznaczonej symbolem H5, opublikowanej w J. Chem. Phys. z 2016 r. został opisany

proponowany układ eksperymentalny, który można będzie, być może, zastosować do obserwacji opisanych efektów, a także oszacować rząd ich wielkości.

Wiele czynników należało rozpatrywać, aby dać odpowiedź o wyborze najbardziej skutecznej metody. Teoretyczną analizę wpływu postulowanych efektów na widmo NMR Autor rozpatrywał, jako zależne od dwóch czynników: po pierwsze – od chiralności cząsteczki i po drugie - jaka ilość spinów jądrowych w układzie jest wymagana do ich obserwacji. W ten sposób powstał zbiór omawianych efektów (i zatem zbiór artykułów), jako najważniejszych czynników. Rozpatrywane były m.in. zagadnienia:

1. Poprzeczna relaksacja w polu elektrycznym, która pozwala na wyznaczenie izotropowego tensora magnetycznego ekranowania, oraz poprzeczna składowa magnetyzacji indukowanej przez pole elektryczne [H1, H2];
2. Wykorzystanie polaryzacji elektrycznej indukowanej przez asymetrię tensora ekranowania, efekt, który został przewidziany przez Buckinghama [H3, H7];
3. Sprzężenia spin-spin i wkład antysymetrycznego tensora sprzężenia molekuly chiralnej o trwałym niezerowym momencie dipolowym w przypadku obecności pola elektrycznego [H3, H6];
4. Wyprowadzenie równań Blocha w przypadku obecności pola elektrycznego. Rejestracja sygnałów NMR, zaprojektowanie parametrów rezonatora stanowi treść publikacji 5 [H5].

Zarysowany w powyższy sposób zakres materiału przedstawiony i dyskutowany w publikacjach został skrótowo, lecz pod kątem ewentualnej realizacji praktycznej podsumowany przez Habilitanta w Autoreferacie. I ten fragment dokumentacji stanowi cenny materiał dla osób zainteresowanych rozwojem metody NMR. Czyta się go z przyjemnością. Jasno sformułowany cel rozprawy, logiczny rozwój tematyki i krytyczne, własne podsumowanie zaproponowanej metody i otrzymanych wyników świadczą o naukowej rzetelności Habilitanta. W wnioskach końcowych Autoreferatu Autor rzetelnie podsumowuje zalety i wady omawianych przez siebie efektów NMR, wskazując możliwości dalszych udoskonaleń.

Powyżej nie wymieniłam publikacji oznaczonej symbolem H4, która przy pierwszym czytaniu wydawała mi się najbardziej tajemniczą. W tej publikacji Autor proponuje bezpośrednie rozróżnienie enancjomerów w przypadku cząsteczek o spinie jądrowym równym  $\frac{1}{2}$ , mających niezerowy moment dipolowy poprzez wyznaczenie magnetyzacji indukowanej, określanej terminem angielskim dwuwymiarowej *the dipole-NSD2 cross*

*correlations.*

Moim zdaniem, wyniki badań uzyskane przez Habilitanta w sposób istotny poszerzają dotychczasową wiedzę w dziedzinie tak ważnej jak spektroskopia NMR wykorzystywana do nowych badań molekuł chiralnych. Dr Garbacz wykazał głęboką znajomość literatury przedmiotu, umiejętność racjonalnego planowania i realizowania interesujących badań oraz zdolność do formułowania wniosków. A zrozumienie wyżej omawianych mechanizmów pozwoli na rozszerzenie stosowania NMR do badań ważnych dla chemików zagadnień.

Na zakończenie tej części recenzji pozwolę sobie przytoczyć dane bibliograficzne: Habilitant jest Autorem/współautorem 22 publikacji o sumarycznym IF=68 i indeksie H=7 o oraz liczbie cytowań (bez auto) = 126 (dane 07.2018). Zważywszy, że powyższa tematyka, chociaż jest innowacyjna, jednocześnie jest dość elitarna, uważam powyższe wskaźniki za bardzo dobre, a w przypadku, gdy uda się zrealizować ich wersję doświadczalną, będą powyższe dane promieniować przez długie lata.

Rozprawę oceniam pozytywnie pod względem jej wartości naukowej. Wkład Autora do badań ważnych z punktu widzenia zastosowań NMR nie budzi wątpliwości. Wyniki uzyskane przez dr Garbacz stanowią istotną nowość naukową. Rozprawa w pełni odzwierciedla walory naukowe Habilitanta jako przyszłego samodzielnego badacza. Nie ulega dla mnie wątpliwości, że *nazwisko dr Garbacza będzie związane, rozpoznawane i kojarzone w przyszłości w świecie naukowym z badaniami nad rozszerzeniem zastosowań metody NMR w chemii i fizyce*. Należy życzyć Habilitantowi, aby zaproponowane idee i rozwiązania potwierdziły się w praktyce.

### **III. Ocena naukowej działalności Habilitanta**

Po odbyciu studiów doktoranckich w ramach Międzynarodowych Studiów Doktoranckich na Wydziale Chemii UW Habilitant odbył studia podoktorskich. W tym okresie opublikował dziewięć prac naukowych, które koncentrują się na interpretacji i obliczaniu parametrów NMR metodami kwantowo-chemicznymi. Zwracają uwagę publikacje poświęcone badaniom ekranowania i stałej spin-spin molekuly wodoru i deuterku wodoru oraz efektów izotopowych w innych cząsteczkach. Wydzielony od rozprawy habilitacyjnej dorobek naukowy jest bardzo dobry. Świadczy o zdobywaniu przez dr Garbacz doświadczenia w dziedzinie obliczeń kwantowych i wykonywaniu pomiarów.

Rozprawa dowodzi, że Habilitant ma opanowany warsztat badawczy zarówno z aplikacyjnej chemii kwantowej, jak i doświadczalnej spektroskopii NMR. Dzielił się

wynikami swoich badań wygłaszając ustne komunikaty i prezentując postery na wielu konferencjach. Szeroka współpraca naukowa z ośrodkami zagranicznymi jest wyrazem umiejętności pracy Habilitanta w zespole, jak i otwartego podejścia do badań naukowych.

#### **IV. Ocena działalności dydaktycznej i organizacyjnej**

Dr Garbacz prowadził różnorodne zajęcia dydaktycznych w macierzystej Uczelni. Były to następujące zajęcia: Pracownia ze studentami Inżynierii Nanostruktur oraz Energetyki i Chemii Jądrowej. Brał udział w zajęciach w Laboratorium Spektroskopii Molekularnej i Chemii Fizycznej. Był kierownikiem jednej pracy licencjackiej i jednej magisterskiej. Prowadził także projekty badawcze z młodzieżą z fizyki.

Uzyskanie stopnia naukowego doktora habilitowanego pozwoli z pewnością na utworzenie dynamicznego zespołu badawczego z grupą zaangażowanych doktorantów i prowadzenia wykładów przewidzianych w harmonogramie studiów oraz przyciągnięcie do współpracy najbardziej chętnych i uzdolnionych studentów.

#### **V. Ocena końcowa**

Podsumowując, uważam, że dorobek naukowy dr Piotra Garbacza jest bardzo wartościowy i stanowi istotny wkład w rozwój Jądrowego Rezonansu Magnetycznego i wykorzystywanie tej metody spektroskopowej do badania chiralności, tak ważnej dla chemii i fizyki. Ocena ta, w połączeniu z przytoczoną wyżej pozytywną oceną rozprawy habilitacyjnej, prowadzi do wniosku, że spełnione są wymogi Ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki. Przeto wnoszę o dopuszczenie dr Garbacza do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

Joanna Sadlej