

Prof. dr. hab. Danuta Kruk
Wydział Matematyki i Informatyki
Uniwersytetu Warmińsko-Mazurskiego w Olsztynie
ul. Słoneczna 54, 10-710 Olsztyn
danuta.kruk@matman.uwm.edu.pl
tel: 895246011, 516849233

**Recenzja rozprawy habilitacyjnej Pana dr Piotra Grabacza:
Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego w polu elektrycznym**

Dr Piotr Grabacz przedstawił jako swoją rozprawę habilitacyjną zatytułowaną: “Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego w polu elektrycznym” cykl siedmiu publikacji w bardzo dobrych czasopiśmie naukowych. We wszystkich przypadkach Pan dr Garbacz jest pierwszym autorem publikacji, a w pięciu jedynym. Nie pozostawia to wątpliwości co do oryginalności pomysłu naukowego i samodzielności w jego realizacji.

Idea naukowa będąca myślą przewodnią przedstawionej rozprawy habilitacyjnej jest, moim zdaniem, niezwykle oryginalna. Polega ona, ujmując zagadnienie ogólnie, na zastosowaniu zewnętrznego pola elektrycznego w spektroskopii Magnetycznego Rezonansu Jądrowego (MRJ). W ten sposób można uzyskać informacje o subtelnym własnościach strukturalnych cząsteczek, takich jak chiralność – informacje te nie są dostępne w „tradycyjnej” spektroskopii MRJ. Koncepcja ta jest w swej istocie prosta (to stwierdzenie absolutnie nie ma znaczenia pejoratywnego): Hamiltonian magnetycznych oddziaływań spinowych (powiązany z magnetycznym momentem dipolowym) jest niezmienniczy względem pewnych operacji symetrii, w przeciwieństwie do Hamiltonianu opisującego oddziaływanie dipolowego momentu elektrycznego z polem elektrycznym. Wydaje się więc naturalne połączenie tej wiedzy: wprowadzenie oddziaływania momentu elektrycznego z polem elektrycznym do Hamiltonianu spinowego opisującego zachowanie spinu jądrowego spowoduje, że wyniki spektroskopii MRJ zaczną odzwierciedlać efekty symetrii cząsteczek. Droga od sformułowania tej koncepcji do jej realizacji jest jednak długa i wymagająca obszernej wiedzy – począwszy od opracowania odpowiedniego opisu teoretycznego przewidywanych efektów, poprzez konstrukcję odpowiedniego układu eksperymentalnego, do weryfikacji eksperymentalnej przewidywań teoretycznych. Pan dr Garbacz przeszedł tę drogę praktycznie samodzielnie i zrobił to w bardzo krótkim czasie. Trudno o lepszy dowód, że ktoś potrafi samodzielnie prowadzić nowatorskie badania naukowe.

Podstawowym elementem teoretycznym przesądającym o sukcesie pomysłu Pana dr Garbacza jest obserwacja, że człony liniowe Hamiltonianu oddziaływania z polem elektrycznym nie znikają w perturbacyjnym rozwiązaniu (przy zastosowaniu rachunku zaburzeń) równania Liouville von Neumann. Pan dr Garbacz twierdzi, że sytuacja taka ma miejsce nie tylko w

przypadku gdy cząsteczka posiada permanentny elektryczny model dipolowy, lecz również w przypadku momentu indukowanego. Osobiście uważam, że wielkość diskutowanego efektu w przypadku indukowanego momentu elektrycznego powinna być przedmiotem dalszych rozważań. Nie umniejsza to jednak znaczenia pomysłu naukowego Pana dr Garbacza. Należy zauważyć, że spektroskopia dielektryczna wymaga permanentnego momentu elektrycznego, a mimo to jest to bardzo cenna metoda badań procesów dynamicznych w materii skondensowanej.

Pan dr Grabacz przewidział możliwość uzyskania szeregu unikalnych informacji o strukturze molekuł, opracował odpowiedni aparat teoretyczny i protokół eksperymentalny i potwierdził eksperymentalnie swoje przewidywania teoretyczne. Najważniejsze informacje, które można uzyskać wykorzystując oddziaływanie molekuł z zewnętrznym polem elektrycznym to:

- wyznaczenie tensora ekranowania ciężkich jąder poprzez analizę wkładu do relaksacji spin-spin pochodzącego od Hamiltonianu oddziaływania z polem elektrycznym
- określenie położenia fragmentu cząsteczki względem jej trwałego dipolowego momentu elektrycznego. Jest to możliwe poprzez wyznaczenie pozadiagonalnych wkładów do macierzy relaksacji pochodzących od oddziaływania z polem elektrycznym, zależnych od orientacji osi łączących jądra (atomy) w cząsteczce względem jej momentu elektrycznego.
- rozróżnienie pomiędzy enancjomerami poprzez wyznaczenie orientacji pomiędzy wektorem magnetyzacji cząsteczki i wektorem jej polaryzacji elektrycznej
- możliwość wyznaczenia absolutnej konfiguracji nanocząsteczki (poprzez analizę znaków sygnałów magnetycznych i elektrycznych), wykorzystując wyniki standardowych obliczeń kwantowo-mechanicznych
- możliwość wyznaczenia względnej orientacji tensorów oddziaływań spinowych

Oprócz cyklu prac przedstawionych jako rozprawa habilitacyjna, Pan dr Garbacz jest pierwszym autorem dziewięciu innych prac opublikowanych w bardzo dobrych czasopismach (po uzyskaniu doktoratu) i współautorem (w dwóch przypadkach pierwszym autorem) sześciu prac przed uzyskaniem stopnia doktora.

Pan dr Garbacz kierował również projektem naukowym Narodowego Centrum Nauki, SONATA 10, nr 2015/19/D/ST4/00953 pt. "Nowa metoda bezpośredniego określania chiralności: jądrowy rezonans magnetyczny w zmiennym w czasie polu elektrycznym" (2016-2018). Zdolność pozyskania środków finansowych na badania jest, moim zdaniem, niezaprzeczalnym certyfikatem uzyskania samodzielności naukowej.

Pan dr Grabacz posiada również doświadczenie w pracy naukowej w międzynarodowych zespołach badawczych wyniesione z Laboratory of Nanoscale Organisation and Dynamics, University of Western Sydney (Sydney, Australia); Solid-state NMR Group, University of Alberta (Edmonton, Kanada), Max Planck Institute for Intelligent Systems (Stuttgart, Niemcy)

oraz Laboratoire National des Champs Magnétiques Intenses, Centre National de la Recherche Scientifique (Grenoble, Francja).

Wspomnieć należy również samodzielny patent krajowy Pana dr Garbacza i jego duże zaangażowanie w pracę dydaktyczną. Przygotowanie autorskich zajęć dydaktycznych wymaga dużo czasu i wysiłku.

Choć nie jest to przedmiotem oceny, chciałabym zwrócić uwagę na sposób w jaki Pan dr Garbacz przygotował swój autoreferat i opis uzyskanych wyników naukowych. Jest to spójne, starannie przemyślane, merytoryczne zestawienie. Sposób w jaki Pan dr Garbacz opisuje istotę zagadnienia pokazuje jego doskonale zrozumienia aspektów teoretycznych i eksperymentalnych procesów rezonansu spinowego.

Zwyczajowo w recenzjach odnosi się do wskaźników typu H-index czy też liczba cytowań. W tym przypadku nie są one wysokie. Wynika to jednak z faktu, że tematyka podjęta przez Pana dr Garbacza jest nowa i trudna, a nie z tego, że nie wzbudza zainteresowania społeczności naukowej. Prace, które wykorzystują zaawansowany aparat matematyczny nie stają się popularne łatwo i szybko, bo najpierw muszą być dokładnie zrozumiane, a to wymaga wielu „powtórzeń” typu: „w oparciu o metodę ... wyznaczono parametry ...”.

Zapoznając się z dorobkiem naukowym Pana dr Garbacza, bardzo szybko zaczęłam się zastanawiać nad dalszym rozszerzeniem tej tematyki, między innymi zadałam sobie pytanie jakie nowe efekty można by zaobserwować gdyby zredukować pole magnetyczne do niskich wartości, tak by oddziaływanie z zewnętrznym polem elektrycznym stało się porównywalne z oddziaływaniem Zeemanowskim. Mam nadzieję, że Pan dr Garbacz zechce podjąć ze mną dyskusję na ten temat.

Na tym etapie jednak moim zadaniem jest stwierdzenie, że: dorobek naukowy i rozprawa habilitacyjna Pana dr Piotra Grabacza reprezentuje bardzo wysoki poziom naukowy, który wynika z oryginalnej, samodzielnie zrealizowanej idei naukowej. Realizacja ta wymagała połączenia wyjątkowej wiedzy teoretycznej i eksperymentalnej z dziedziny Magnetycznego Rezonansu Jądrowego, oraz opanowania złożonego formalizmu matematycznego.

Przedstawiona rozprawa habilitacyjna spełnia wszystkie wymogi i może być podstawą do nadawania stopnia naukowego doktora habilitowanego. Ponadto uważam, że praca ta zdecydowanie zasługuje na wyróżnienie.



Danuta Kruk

Karlsruhe, 25.11.2018