

Uchwała komisji habilitacyjnej
w sprawie nadania dr Angelice Baranowskiej-Łączkowskiej
stopnia doktora habilitowanego
w dziedzinie: nauki chemiczne
dyscyplina: chemia

Po przeprowadzeniu postępowania habilitacyjnego zgodnie z Ustawą o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki z dnia 14 marca 2003 r. (Dz.U. z 2016 r. poz. 882 i 1311 oraz Dz.U. z 2017 r. poz. 859) oraz w oparciu o Rozporządzenie Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 26 września 2016 r. w sprawie szczegółowego trybu i warunków przeprowadzania czynności w przewodzie doktorskim, postępowaniu habilitacyjnym oraz postępowaniu o nadanie tytułu profesora (Dz. U. z 2016 r. poz. 1586), komisja habilitacyjna w składzie:

prof. Maciej Bagiński – przewodniczący komisji,

prof. Jacek Korchowiec – recenzent,

prof. Szczepan Roszak – recenzent,

prof. Andrzej Sobolewski – recenzent,

dr hab. Jan Małecki – członek komisji,

prof. Andrzej Sokalski – członek komisji,

dr hab. Krzysztof Strasburger – sekretarz komisji,

wyraża opinię, że dorobek naukowy dr Angeliki Baranowskiej-Łączkowskiej spełnia wymagania ustawowe do nadania kandydatce stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk chemicznych, w dyscyplinie chemia. Komisja kieruje, do Rady Wydziału Chemicznego Politechniki Wrocławskiej, wniosek o nadanie dr Angelice Baranowskiej-Łączkowskiej stopnia doktora habilitowanego.

Uzasadnienie:

Komisja habilitacyjna, powołana przez Centralną Komisję do Spraw Stopni i Tytułów, pozytywnie zaopiniowała wniosek o nadanie stopnia doktora habilitowanego nauk chemicznych, w dyscyplinie chemia, dr Angelice Baranowskiej-Łączkowskiej. Podczas posiedzenia, dnia 4 stycznia 2018 r., recenzenci i pozostali członkowie komisji wysoko ocenili przedstawione osiągnięcie naukowe (cykl 9 publikacji), stanowiące podstawę wniosku oraz całkowity dorobek naukowy, dydaktyczny i organizacyjny kandydatki.

Recenzenci odnieśli się do tematyki osiągnięcia naukowego dr Baranowskiej-Łączkowskiej, dotyczącego projektowania baz funkcyjnych dedykowanych obliczaniu konkretnych właściwości cząsteczek. Bazy te mają mniejsze rozmiary od baz standardowych, jednocześnie umożliwiając otrzymanie wyników o podobnej dokładności. Jak zauważył w swojej recenzji prof. Jacek Korchowiec, "Wielu użytkowników oprogramowania kwantowo-chemicznego nie zdaje sobie sprawy z faktu, że wybór bazy funkcyjnej jest kluczowym elementem poprawnego opisu struktury elektronowej cząsteczek i ich wybranych właściwości. To one decydują o dokładności danej metody. Mają także decydujący wpływ na koszt prowadzonych obliczeń i wykorzystanie pamięci operacyjnej komputerów." Precyzując ten problem, wyjaśnił dalej, że "Standardowe bazy funkcyjne, np. bazy korelacyjno-konsystentne, opracowane w grupie Dunninga, podążają systematycznie w kierunku bazy zupełnej. Cena za tę poprawę zbieżności jest bardzo duża - zwielenokrotnienie bazy związane jest z koniecznością dołączenia kolejnych zespołów funkcji polaryzacyjnych, co praktycznie wyklucza zastosowanie tych baz funkcyjnych w metodach post-Hartree-Fockowskich". Prof. Andrzej Sobolewski, w podobnym duchu napisał we wstępie, poprzedzającym szczegółowe omówienie prac habilitantki, że "Jednym z rozwiązań tego problemu są bazy funkcyjne zaprojektowane do obliczeń konkretnego typu własności badanego układu molekularnego. Tym właśnie tropem podąża dr Baranowska w serii prac składa-

jących się na jej osiągnięcie habilitacyjne. Prace te są związane z poszukiwaniem nowych baz funkcyjnych zaprojektowanych do obliczeń liniowych i nieliniowych własności elektrycznych cząsteczek i kompleksów molekularnych, indukowanych oddziaływaniami międzycząsteczkowymi, jak również z zewnętrznym polem elektrycznym”. Profesor Roszak zwrócił uwagę na dwa podejścia do problemu konstrukcji baz: “Podejście wiążące bazy funkcyjne z wybranymi zjawiskami fizycznymi (w tym przypadku jest to model oscylatora harmonicznego w zewnętrznym polu elektrycznym) i podejście statystyczne, poszukujące parametrów w celu skutecznego odtworzenia znanych właściwości. Prace H1 do H6 (bazy LPol-n) w dużym stopniu odwołują się do modelu fizycznego i są kontynuacją prac pani dr Baranowskiej-Łączkowskiej z okresu opracowywania doktoratu. Natomiast praca nad bazami typu ORP stanowi całkowicie własną drogę z wykorzystaniem bardzo bogatego doświadczenia w generacji baz funkcyjnych. Bazy ORP powstały w dużej mierze dzięki podejściu statystycznemu”.

Zdaniem prof. Korchowca, do głównych osiągnięć habilitantki należy opracowanie baz LPol-n. Są to bazy zaprojektowane do wyznaczenia statycznych i dynamicznych właściwości elektrycznych, tak liniowych, jak i nieliniowych. Bazy te są mniejsze od standardowych baz korelacyjno-konsystentnych, przez co przesuwały granice zastosowań “dokładnych” metod obliczeniowych w kierunku większych układów molekularnych, zachowując dokładność baz standardowych. Habilitantka wykazała, że są one alternatywą dla znacznie większych baz stosowanych do wyznaczania właściwości elektrycznych cząsteczek – obliczenia wykonane na poziomie CCSD(T)/LPOL-ds dają wyniki porównywalne do tych uzyskanych przy użyciu np. bazy d-aug-cc-pVTZ. Prof. Roszak zasugerował starania o zamieszczenie nowo opracowanych baz w bazie danych baz funkcyjnych, np. EMSL. Dr hab. Jan Małecki zwrócił uwagę, że “Zaprojektowanie takich baz jest niewątpliwym osiągnięciem naukowym, chociaż ich wykorzystanie wiąże się z koniecznością dobrej znajomości ograniczeń, jakie zostały przy ich konstrukcji wprowadzone i rozważnego wyboru odpowiedniej bazy przy określaniu właściwości rzeczywistych układów chemicznych”.

Dr Baranowska-Łączkowska może się poszczycić dobrym dorobkiem publikacyjnym. Jak zauważył prof. Andrzej Sokalski, habilitantka “opublikowała do grudnia 2017 roku 34 oryginalne prace naukowe, z czego 29 publikacji po uzyskaniu stopnia doktora nauk chemicznych. Wszystkie te prace opublikowano w czasopiśmie z listy filadelfijskiej, w tym część w najbardziej renomowanych czasopiśmie międzynarodowych, takich jak: Journal of Computational Chemistry, Physical Chemistry Chemical Physics, względnie Journal of Chemical Physics. Sumaryczny czynnik oddziaływania czasopiśm, w których były publikowane prace Habilitantki wynosi 95.199 (w tym 9 prac wchodzących w skład rozprawy habilitacyjnej 28.379). Do grudnia 2017 roku publikacje dr Baranowskiej-Łączkowskiej były cytowane 355 razy (219 razy po odliczeniu autocytowań), ponad dwukrotnie częściej niż wskazywałyby na to wymieniony wyżej statystyczny współczynnik oddziaływania”. Ponadto kandydatka wygłosiła 6 wykładów na konferencjach międzynarodowych i była współautorką 14 posterów.

Komisja wysoko oceniła dorobek dydaktyczny habilitantki. Prof. Korchowiec scharakteryzował go jako nacechowany ogromną, wręcz zaskakującą różnorodnością prowadzonych przez nią zajęć (matematyka, fizyka, chemia, ochrona środowiska i technologie informacyjne). Dr hab. Krzysztof Strasburger zwrócił uwagę, że 8 spośród prowadzonych kursów stanowią wykłady, czyli forma dydaktyczna, tradycyjnie przeznaczona dla pracowników samodzielnych. Pod opieką dr Baranowskiej-Łączkowskiej (w charakterze promotora lub współpromotora) powstało 5 prac magisterskich i 3 licencjackie, a studenci byli włączani w nurt prowadzonych badań, co zaowocowało 3 publikacjami naukowymi.

Komisja zwróciła uwagę na rozległą działalność organizacyjną habilitantki. Pełni ona funkcje zastępcy dyrektora Instytutu Fizyki Uniwersytetu Kazimierza Wielkiego oraz kierownika Zakładu Fizyki Teoretycznej i Informatyki w tym instytucji. Bierze udział w pracach dwóch komisji wydziałowych na Wydziale Matematyki, Fizyki i Techniki, a także jest przewodniczącą Rady Programowej kierunku fizyka.

W podsumowaniu, prof. Sobolewski wyraził następującą opinię: “Należy podkreślić, że zaprezentowany

jako osiągnięcie habilitacyjne cykl prac stanowi realizację dobrze zdefiniowanego i spójnego projektu badawczego, który stanowi istotny wkład do rozwoju metod obliczeniowych chemii kwantowej”. Według prof. Roszaka, “Przedstawiony do oceny materiał pozwala stwierdzić, że pani dr Angelika Baranowska-Łączkowska jest w pełni ukształtowanym, samodzielnym, pracowitym i ambitnym naukowcem. Habilitantka posiada oryginalny dorobek naukowy poparty publikacjami w bardzo dobrych czasopismach naukowych oraz inną działalnością w przestrzeni nauki (udział w konferencjach, recenzje w pismach naukowych, staże naukowe)”. W zgodnej opinii recenzentów i pozostałych członków komisji, osiągnięcie naukowe dr Angeliki Baranowskiej-Łączkowskiej oraz jej pozostałe dokonania na polu zawodowym wypełniają ustawowe i zwyczajowe wymagania dotyczące habilitacji. Biorąc pod uwagę całokształt działalności zawodowej kandydatki, komisja ocenia go jako ponadprzeciętny. Komisja w głosowaniu jawnym jednomyślnie podjęła uchwałę o skierowaniu, do Rady Wydziału Chemicznego Politechniki Wrocławskiej, wniosku o nadanie dr Angelice Baranowskiej-Łączkowskiej stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk chemicznych, w dyscyplinie chemia.

Podpisy członków komisji:

prof. Maciej Bagiński

prof. Jacek Korchowicz

prof. Szczepan Roszak

prof. Andrzej Sobolewski

dr hab. Jan Małecki

prof. Andrzej Sokalski

dr hab. Krzysztof Strasburger

Maciej Bagiński

J. Korchowicz

S. Roszak

A. Sobolewski

dr hab. Jan Małecki

prof. Andrzej Sokalski

dr hab. Krzysztof Strasburger