

prof. dr hab. Józef Eugeniusz Sienkiewicz
Katedra Fizyki Teoretycznej i Informatyki Kwantowej
Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej
Politechnika Gdańska
ul. G. Narutowicza 11/12
80-952 Gdańsk

POLITECHNIKA GDAŃSKA
WYDZIAŁ FIZYKI TECHNICZNEJ
I MATEMATYKI STOSOWANEJ

Wpłynęło dnia 13.10.2014 r.
L. dz. 52/NFT i MS/SN/2014
Zał. —

Gdańsk, dn. 12 października 2014 r.

Recenzja rozprawy habilitacyjnej i dorobku naukowego dr. Juliana Guthmullera

Dr Julien Guthmuller jest obecnie zatrudniony na stanowisku adiunkta na Wydziale Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechniki Gdańskiej. W roku 2002 ukończył studia licencjackie z fizyki na Uniwersytecie Ludwika Pasteura w Strasbourgu. Rok później uzyskał tytuł magistra fizyki na Uniwersytecie Claude'a Bernarda w Lyonie. Doktorat z fizyki molekularnej napisany pod kierunkiem Prof. Daniela Simona został obroniony na tym samym uniwersytecie w roku 2006. Następnie habilitant odbył dwa ponad dwuletnie staże podoktorskie: pierwszy w belgijskim Uniwersytecie Notre-Dame w Namur, drugi na Uniwersytecie Fryderyka Schillera w Jenie.

Rozprawa habilitacyjna

Przedstawiona do oceny rozprawa habilitacyjna pt. „Teoretyczne badania elektronowej i oscylacyjnej spektroskopii organicznych barwników i związków kompleksowych metali przejściowych” jest jednotematycznym cyklem 11 wybranych z dorobku habilitanta artykułów naukowych. Chciałbym zaznaczyć, że zgodnie z ustalonymi wymogami zostały dostarczone oświadczenia współautorów o ich wkładzie w powstanie tych artykułów.

Pierwszych sześć artykułów (H1-H6) przedstawia wkład habilitanta do rozwoju teoretycznych i obliczeniowych metod stosowanych do opisu rezonansowych widm Ramana organicznych chromoforów i związków kompleksowych metali przejściowych. Podejście teoretyczne rozwinięte przez habilitanta wykorzystuje wibronową teorię rozproszenia promieniowania. Do wykonywania obliczeń habilitant zastosował zależną od czasu metodę

funkcjonału gęstości i napisał odpowiedni program komputerowy. Dzięki temu obliczył natężenie rezonansowych widm Ramana wybranego chromoforu dla szeregu długości fali powodującej wzbudzenie przy uwzględnieniu sprzężeń wibronowych za pomocą czynników Francka-Condon. Wziął również pod uwagę oddziaływanie z rozpuszczalnikiem za pomocą metody polaryzowalności ośrodka ciągłego. Przedstawione wyniki, wskazują na konieczność prawidłowego uwzględnienia energii wymiany i efektów korelacyjnych, co habilitant dokonał za pomocą zaproponowanego przez siebie funkcyjonału. Otrzymane wyniki pokazują dobrą zgodność otrzymanej struktury wibronowej stanu wzbudzonego i rezonansowego widma Ramana. Jednocześnie, w przekonujący sposób, przedstawił zmianę natężeń w zależności od rodzaju użytego rozpuszczalnika. Te badania były kontynuowane dla cząsteczki rodaminy w celu dokonania porównań z danymi doświadczalnymi. Porównanie obliczonych przez habilitanta widm z danymi doświadczalnymi daje bardzo dobrą zgodność i tym samym wskazuje na trafność przyjętej metody obliczeniowej pozwalającej na dokładne określenie wpływu sprzężeń wibronowych.

Uogólnienie powyższej metody w celu uwzględnienia oddziaływań pomiędzy wzbudzonymi stanami elektronowymi pozwoliły na dokładne obliczenia własności spektroskopowych wybranego dużego kompleksowego związku rutenu, którego fotofizyczne właściwości stwarzają szansę na praktyczne zastosowania. Na podstawie tych badań dr Guthmuller przedstawił cały szereg ważnych wniosków wskazujących na konieczność uwzględnienia czterech różnych przejść z przeniesieniem ładunku od metalu do ligandu. Oprócz tego wskazał na konieczność wzięcia pod uwagę interferencji pomiędzy dającymi wkład do widma stanami oraz efektów solwatacyjnych. Do tej części rozprawy zostały włączone badania, przedstawione w samodzielnej pracy habilitanta, nad zastosowaniem różnych metod obliczeniowych do określania gradientów stanów wzbudzonych. Gradienty stanu wzbudzonego są niezbędne w prawidłowym opisie geometrii stanu wzbudzonego i powierzchni energii potencjalnej. Stosowne obliczenia zostały wykonane dla związku o-nitrofenolu, którego wybór był podyktowany dostępnością wielu danych doświadczalnych. Autor rozprawy habilitacyjnej dokonał szczegółowej analizy wpływu użytych funkcyjonałów na obliczane właściwości stanu podstawowego i stanów wzbudzonych. Doświadczenie zdobyte w tej pracy zostało wykorzystane w badaniach bardziej złożonych związków.

Piąty artykuł z przedstawionego cyklu opisuje kontynuację badań nad złożonymi kompleksami metali przejściowych, które dostarczyły cennych informacji na temat ich fotofizycznych właściwości, a tym samym stworzyły teoretyczne podstawy do budowy doskonalszych słonecznych ogniw barwnikowych i wodorowych fotokatalizatorów.

Następnie habilitant poszerzył te badania na organiczne barwniki typu donor-akceptor. Jednym z osiągnięć tej pracy jest zastosowanie do obliczeń rezonansowych widm ramanowskich, obok dotąd używanej zależnej od czasu metody funkcjonału gęstości, zaawansowanych metod chemii kwantowej jak wielokonfiguracyjna metoda ograniczonej przestrzeni aktywnej pola samouzgodnionego z jednoczesnym odpowiednim użyciem rachunku zaburzeń.

Druga część rozprawy zawiera trzy prace (H7-H9) poświęcone rozwojowi i zastosowaniu metody generacji częstości do opisu natężeń widm monowarstw umieszczonych na metalowym podłożu. W celu obliczenia widm habilitant napisał odpowiedni program komputerowy w Fortranie. Również w tej części można zauważyć pełne odniesienie do danych eksperymentalnych, w tym w ścisłej współpracy z grupą doświadczalną z Uniwersytetu w Namur. Szczególną uwagę zwrócono na orientację adsorbowanych molekuł. Habilitant wykazał, że przedstawiona technika może być wykorzystywana do badania właściwości orientacyjnych samoorganizujących się monowarstw. Ważną rzeczą jest to, że orientacja cząsteczki może być wyznaczona jedynie przez połączenie wyników przeprowadzonych przez habilitanta obliczeń z danymi doświadczalnymi. Doniosłość tej pracy polega na rozwinięciu efektywnej metodologii stanowiącej podstawę do dalszych prac nad spektroskopią monowarstw. W następnej pracy habilitant wykorzystał tak opracowaną metodologię do obliczania widm dla kilku wybranych monowarstw związków chemicznych takich jak alkanetiol i p-nitrofenol na powierzchniach platyny i złota. Szczególną uwagę zwrócił na konieczność wykorzystania dodatkowych informacji pochodzących z doświadczenia o polaryzacji stosowanych wiązek co prowadzi do zadowalających wyników o orientacji molekuł. W trzeciej pracy z tej części rozprawy zbadano właściwości warstw granicznych typu ciecz-ciało stałe ze szczególnym wykorzystaniem modelu uwzględniającego orientację cząsteczek.

Dwie ostatnie prace (H10 i H11) stanowią podstawę trzeciej i ostatniej części rozprawy habilitacyjnej. Przedstawiają one wyniki obliczeń struktury wibronowej widm absorpcji wybranych dimerów. W celu wykonania odpowiednich obliczeń numerycznych habilitant napisał program do obliczania wielowymiarowych czynników Francka-Condon w połączeniu z metodą funkcjonału gęstości. Znaczącym osiągnięciem habilitanta jest stworzenie, rozwinięcie i zastosowanie wibronowej teorii ekscytonowo sprzężonych dimerów. W pierwszej z tych prac, autor rozprawy zastosował swoje podejście do obliczeń widm absorpcyjnych streptocyjaniny i jej dimeru. W wyniku przeprowadzonych obliczeń udało się odtworzyć przesunięcie maksimum absorpcji pojawiające się wskutek dimeryzacji.

Dodatkowym atutem było uwzględnienie efektów solwatacyjnych, co miało wpływ na dokładność otrzymanych wyników. W ostatniej pracy przedstawiono udoskonaloną wersję wykorzystanego poprzednio podejścia dokonaną rozszerzenie bazy funkcyjnej dimeru.

Inne osiągnięcia naukowe

Pozostały dorobek, nie wchodzący do rozprawy habilitacyjnej, składa się z 22 artykułów naukowych opublikowanych w renomowanych czasopismach naukowych. Dotyczą one całego szeregu bieżących problemów fizyki molekularnej. Do najważniejszych opisanych w tych artykułach osiągnięć można zaliczyć opis układów cząsteczek o nieliniowych właściwościach optycznych mierzonych przy wykorzystaniu spektroskopii opartej na generacji drugiej harmonicznej i rozpraszaniu Rayleigha. Ponadto, habilitant wykonał m.in. badania nieliniowych właściwości optycznych wybranych mezogenów, np. określając wpływ wielkości kąta pomiędzy ramionami cząsteczki na jej właściwości optyczne. Również zbadał optyczne właściwości fioletu krystalicznego chromoforu w wodnym roztworze. Za pomocą metody funkcjonału gęstości dokonał identyfikacji stanów trypletowych całego szeregu kompleksów. Również zbadał ich temperaturowe właściwości. Obecnie, we współpracy z gdańską grupą doświadczalną, rozwija badania nad energią jonizacji i widmami fotoelektronów dla małych i średnich molekuł.

Dane z bazy Web of Science wskazują na rosnącą z roku na rok liczbę cytowań dr. Guthmullera. W roku 2012 odnotowano ponad sto cytowani. Indeks Hirscha habilitanta wynosi 13.

Działalność organizacyjna i dydaktyczna

Chciałbym również podkreślić organizacyjną aktywność dr. Guthmullera w międzynarodowym środowisku naukowym. Jest on polskim przedstawicielem w Komitecie Sterującym europejskiej akcji COST-u poświęconej fotokatalicznym właściwościom wody. W innej akcji COST-u Nano-IBCT bierze czynny udział jako uczestnik badań naukowych. Brał udział w pracach kierowanego przeze mnie komitetu organizacyjnego międzynarodowej konferencji w ramach jeszcze innej akcji COST-u nazwanej XLIC. Co najważniejsze w 7 Programie Ramowym Unii Europejskiej zdobył poważny grant integracyjny na zaadaptowanie się w nowym miejscu pracy jakim jest dla niego Politechnika Gdańska.

Pracując na stanowisku adiunkta dr Guthmuller prowadził szereg zajęć dydaktycznych, w tym z fizyki współczesnej, algorytmów i struktur danych. Był opiekunem

kilku obronionych prac dyplomowych. Jest solidnym i cenionym pracownikiem dydaktycznym.

Podsumowanie

W podsumowaniu oceniam, że rozprawa habilitacyjna wraz z przedstawionym dorobkiem naukowym wnosi znaczący wkład do rozwoju metod teoretycznych wykorzystywanych w badaniach optycznych właściwości molekuł. Dr Guthmuller dokonał udanej implementacji metody obliczania natężeń rezonansowych widm ramanowskich. Zbadał wpływ sprzężeń wibronowych na natężenia tych widm. Objął swoimi badaniami związki kompleksowe. Potrafił dokonać obliczeń za pomocą różnych metod w celu określenia gradientu stanu wzbudzonego. Jako pierwszy zastosował metodę ograniczonej przestrzeni aktywnej pola samouzgodnionego w opisie rezonansowych widm ramanowskich. Wykorzystując ścisłą współpracę z doświadczalnikami opisał orientację molekuł na powierzchniach metalicznych. Wskazał na konieczność obliczeń elementów tensora hiperpolaryzowalności dla grupy metylowej za pomocą metod chemii kwantowej. Wreszcie trafnie przewidział własności absorpcyjne wybranych dimerów.

Pozostały dorobek dr. Guthmullera jest na tyle poważny, że w razie konieczności dałoby się z niego wykroić drugą rozprawę habilitacyjną.

Wniosek końcowy

Uważam, że zgodnie z obowiązującymi normami prawnymi i zwyczajowymi przedstawiona do oceny rozprawa habilitacyjna dr. Julina Guthmullera powinna zostać dopuszczona do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

