

Wpłynęło dnia 22.10.2014 r.
L. dz. 59/12FT/MS/SN/2014
Zaś.

Kraków, 16.10.2014 r.

dr hab. Przemysław Piekarz
Zakład Komputerowych Badań Materiałów
Instytut Fizyki Jądrowej PAN
ul. Radzikowskiego 152
31-342 Kraków

Ocena osiągnięć naukowych oraz istotnej aktywności naukowej

dr. Juliena Guthmullera

Dr Julien Guthmuller jest adiunktem w Katedrze Fizyki Teoretycznej i Informatyki Kwantowej na Wydziale Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechniki Gdańskiej. W roku 2006, Julien Guthmuller obronił pracę doktorską z fizyki zatytułowaną „*Theoretical study of conjugated molecules of biological interest for nonlinear optics*” na Uniwersytecie Claude Bernard Lyon I we Francji pod kierunkiem prof. Daniela Simona. Po doktoracie pracował na dwóch stażach na Uniwersytecie Notre-Dame de la Paix w Namur, Belgia (2007-2009) i w Instytucie Chemii Fizycznej Uniwersytetu Friedricha Schillera w Jenie, Niemcy (2009-2011). Obecnie jest stypendystą grantu Marie Curie Career Integration w ramach projektu VIBRAMAN „*Theoretical simulation of vibrational spectroscopies based on the Raman effect*” na Politechnice Gdańskiej, finansowanego przez 7 Program Ramowy Unii Europejskiej.

Ocena osiągnięć naukowo-badawczych na podstawie przedstawionego jednotematycznego cyklu wybranych publikacji

Przedstawiona do recenzji rozprawa habilitacyjna zatytułowana „*Teoretyczne badania elektronowej i oscylacyjnej spektroskopii organicznych barwników i związków kompleksowych metali przejściowych*” obejmuje monotematyczny cykl 11 prac (oznaczonych numerami od **H1** do **H11**) opublikowanych w latach 2007-2012 w czasopiśmie *Journal of*

Chemical Physics, ChemPhysChem, Journal of Physical Chemistry B, Journal of Chemical Theory and Computation, Journal of Physical Chemistry C i Journal of Physics: Condensed Matter. Czasopisma te mają zasięg ogólnosiwiatowy i wysoki impact factor (w latach publikacji tych artykułów od 2.355 do 5.389, średnia 3.84). Prace te mają znaczną ilość cytowań (od 3 do 48, średnia 15.4). Dr J. Guthmuller jest samodzielnym autorem pracy **H4**, pozostałe prace mają kilku współautorów (od 2 do 9), w siedmiu z nich jest pierwszym autorem. Oświadczenia współautorów prac dołączone do rozprawy wskazują jednoznacznie na wiodącą rolę habilitanta w większości z tych artykułów i znaczny udział w pozostałych. Habilitant ocenia swój udział w siedmiu pracach od 60 do 100%, w dwóch na 35% i dwóch na 25%.

Przedstawione w rozprawie publikacje zostały podzielone na trzy części. Pierwsza obejmuje sześć prac (**H1-H6**) i dotyczy obliczeń z pierwszych zasad widm rezonansowego rozpraszania Ramana (RR) w organicznych chromaforach i związkach metali przejściowych. Spektroskopia RR umożliwia badanie widm oscylacyjnych przy pomocy światła monochromatycznego o energii dostrojonej do wybranego przejścia elektronowego. W widmie rozpraszania RR obserwuje się jednocześnie wzbudzenia stanu elektronowego i oscylacyjnego układu, których intensywności zależą od sprzężeń wibronowych opisanych czynnikami Francka-Condon. Pozwala to badać zarówno własności dynamiczne, jak i modyfikacje w strukturze (zmiany długości wiązań chemicznych) wywołane przejściem do stanu wzbudzonego. Istotną rolę w interpretacji eksperymentów odgrywają obliczenia teoretyczne oparte na teorii funkcjonału gęstości (DFT), które dostarczają informacji o strukturze, widmach oscylacyjnych i stanach elektronowych badanego układu. Dr J. Guthmuller rozwinął metodę teoretyczną i napisał program do wyznaczania intensywności widm RR dla układów molekularnych w oparciu o wibronową teorię rozproszenia ramanowskiego i obliczenia *ab initio*. W celu wyznaczenia stanów wzbudzonych cząsteczek zastosował podejście time-dependent DFT (TDDFT) i pakiet obliczeniowy Gaussian. Metoda została opisana i przetestowana w pracy **H1**, gdzie porównano zmierzone i wyliczone widma RR dla cząsteczek julolidinemalononitrylu (JM) umieszczonych w trzech różnych rozpuszczalnikach. W obliczeniach przetestowano kilka funkcjonałów hybrydowych różniących się udziałem procentowym nielokalnego oddziaływania wymiennego Hartree-Focka. Najlepszą zgodność z wynikami doświadczalnymi otrzymano dla funkcjonału zawierającego 35 % dokładnego oddziaływania wymiennego (B3LYP-35). W kolejnych pracach zastosowano tę metodę do szeregu układów molekularnych: rodaminy 6G (**H2**), kompleksowych związków metali przejściowych (**H3, H5**), związku o-nitrofenol (**H4**) oraz

chromoforu typu donor-(π -mostek)-akceptor opartego na 4-metoxy-1,3-tiazolu (**H6**). W pracy **H5** porównano wyniki obliczeń z nowymi pomiarami rozpraszania RR uzyskanymi w ramach współpracy z Uniwersytetem Friedricha Schillera w Jenie i Uniwersytetem Wiedeńskim. W dwóch pracach (**H4**, **H6**) przeprowadzona została bardzo szczegółowa analiza wpływu różnych funkcjonatów hybrydowych i metod obliczeniowych (TDDFT, CC2, RASSCF) na wyliczone wartości częstości wibracyjnych, energii wzbudzeń, intensywności rozpraszania RR i potencjałów atomowych.

Druga część rozprawy habilitacyjnej obejmuje trzy prace (**H7-H9**) i dotyczy teoretycznej metody wyznaczania natężeń widm IR/UV SFG (z ang. infrared/ultraviolet sum frequency generation spectroscopy) dla samoorganizujących się monowarstw na powierzchni metalicznej. Technika ta wykorzystuje proces nieliniowy, w którym dwa fotony rozpraszające się na granicy dwóch ośrodków przekształcają się w pojedynczy foton. Wiele informacji dotyczących m.in. orientacji absorbowanych cząsteczek można uzyskać jedynie łącząc wyniki eksperymentalne z modelowaniem badanego układu wykorzystując obliczenia z pierwszych zasad. Habilitant napisał program, który umożliwia wyliczenie widm IR/UV SFG w oparciu o podejście DFT. Zaimplementowana metoda została przedstawiona i zastosowana do wyznaczenia widm rozpraszania w podczerwieni, Ramana i IR/UV SFG dla dwóch związków: p-nitrotiofenol oraz 2,4-dinitroanilina (**H7**). Przeanalizowano tutaj bardzo szczegółowo wpływ zmiany bazy stanów elektronowych i funkcjonatu hybrydowego na wyliczone częstotliwości i intensywności rozproszonego promieniowania. Kolejna praca przygotowana wspólnie z grupami eksperymentalnymi przedstawia wyniki pomiarów i obliczeń widm SFG cząsteczek p-nitrotiofenolu (p-NTP) i dodekaneteiolu (DDT) na powierzchniach platyny i złota. Praca **H9** zawiera obliczenia dla kilku modeli grupy metylowej oraz porównanie wyznaczonych orientacji cząsteczki otrzymanych metodą DFT i metodą analityczną.

Ostatnia część rozprawy podsumowuje wyniki dwóch prac (**H10**, **H11**), które dotyczą wyznaczania widm absorpcyjnych dimerów cząsteczek za pomocą modelu ekscytonowego. Habilitant zaproponował nową metodę teoretyczną i napisał program do obliczeń widm absorpcyjnych i struktur wibronowych sprzężonych dimerów cząsteczek. Procedura obliczeniowa została zastosowana do wyznaczenia widm streptocyjaniny i jej połączonym wiązaniem kowalencyjnym dimerem (**H10**) i dla dimeru 4,9,10-perylenetetrakarboksylowego diimidu (**H11**).

Osiągnięcia naukowo-badawcze zawarte w rozprawie habilitacyjnej dra Juliana Guthmullera oceniam bardzo wysoko. Przedstawione prace w znacznym stopniu poszerzają wiedzę na temat własności elektronowych i dynamicznych układów molekularnych, w szczególności w obszarze badań związanych z teoretycznym modelowaniem stanów wzbudzonych i widm oscylacyjnych cząsteczek (rezonansowe rozpraszanie Ramana, widma IR/UV SFG). Bardzo ważnym osiągnięciem habilitanta jest rozwinięcie szeregu metod obliczeniowych i napisanie programów komputerowych, które umożliwiają wyliczenie wielkości fizycznych i parametrów charakteryzujących stany wzbudzone układów molekularnych. Metody te bazują na nowoczesnych i bardzo zaawansowanych technikach obliczeniowych z pierwszych zasad (TDDFT, CC2, RASSCF). Podjęte przez habilitanta tematy badawcze są bardzo ciekawe i dotyczą aktualnych problemów fizyki molekularnej i komputerowych metod obliczeniowych. O wysokim poziomie i dużym znaczeniu tych badań najlepiej świadczy duża ilość cytowań prac dra J. Guthmullera. Za najważniejsze osiągnięcia naukowo-badawcze przedstawione w rozprawie habilitacyjnej uważam:

- 1) rozwinięcie i zaimplementowanie w postaci programu komputerowego metody wyznaczania widm rezonansowego rozpraszania Ramana w oparciu o teorię wibronową i podejście time-dependent DFT,
- 2) zastosowanie w.w. metody do interpretacji pomiarów widm ramanowskich dla szeregu układów molekularnych, w tym złożonych związków metali przejściowych,
- 3) określenie wpływu nielokalnego oddziaływania wymiennego Hartree-Focka na wyliczone widma rozpraszania RR i zaproponowanie optymalnego funkcjonału hybrydowego do opisu wzbudzonych stanów cząsteczki,
- 4) teoretyczne zbadanie wpływu zmiany długości fali światła laserowego na natężenia widma absorpcji i powiązanie tego efektu z mechanizmem sprzężenia wibronowego,
- 5) pierwsze zastosowanie teorii wibronowej rozpraszania RR dla kompleksowych związków metali przejściowych i pokazanie, że włączenie sprzężeń wibronowych jest warunkiem koniecznym prawidłowego opisanie pasm oscylacyjnych,
- 6) pierwsze zastosowanie metody RASSCF do obliczeń widm RR i porównanie z wynikami obliczeń w podejściu TDDFT,
- 7) rozwinięcie i zastosowanie metody teoretycznej do obliczania oscylacyjnych widm IR/UV SFG oraz wyznaczenia orientacji cząsteczek na powierzchniach metalicznych,
- 8) zaproponowanie nowej wibronowej teorii sprzężonych dimerów cząsteczek, w celu zastosowania jej do wyliczenia widm absorpcyjnych.

Ocena dorobku naukowego i aktywności naukowo-dydaktycznej habilitanta

Całkowita liczba publikacji dra J. Guthmullera w momencie przygotowania rozprawy habilitacyjnej wynosiła 33 (31 po otrzymaniu stopnia doktora). Suma wskaźnika Impact Factor dla tych publikacji wynosi 134.124 (Journal Citation Reports), co daje wysoki średni wskaźnik 4.06. Liczba wszystkich cytowań: 415 (Web of Science). Index Hirscha: 13 (Web of Science). W roku 2014, dr J. Guthmuller opublikował jeszcze 3 artykuły, a całkowita liczba cytowań wzrosła do 477 (371 bez autocytowań, stan na 16.10.2014). Znacząca ilość cytowań i wysoki index Hirsha świadczą o wysokim poziomie badań i dużym zainteresowaniu pracami habilitanta. Na uwagę zasługuje wzrost liczby cytowań tych prac w ciągu ostatnich trzech lat.

Tematyka badawcza dotycząca rezonansowego rozpraszania Ramana i widm IR/UV SFG rozwijana była w wielu innych artykułach nie włączonych do rozprawy habilitacyjnej. Dr J. Guthmuller jest współautorem pracy przeglądowej dotyczącej zastosowania rozpraszania RR: *Analysis and characterization of coordination compounds by resonance Raman spectroscopy*, Coord. Chem. Rev. 256 (2012) 1479-1508 [IF2012=11.016, 24 cytowania]. Pozostałe prace obejmują szerokie spektrum zagadnień i dotyczą m.in. nieliniowych własności optycznych, fotokatalizy i wyznaczania widm fotoelektronów. Wiele z tych prac zawiera nowe wyniki doświadczalne co świadczy o dobrej współpracy dra J. Guthmullera z grupami eksperymentalnymi. Najczęściej cytowana praca dotyczy formowania się cząsteczek H₂: *Photochemical Fate: The First Step Determines Efficiency of H₂ Formation with a Supramolecular Photocatalyst*, Angew. Chem. Int. Ed. 49 (2010) 3981 [IF2010=12.730, 74 cytowań].

Dr J. Guthmuller brał udział w 4 projektach badawczych realizowanych na Uniwersytecie w Namur (Belgia) i na Uniwersytecie Friedricha Schillera w Jenie (Niemcy). Obecnie uczestniczy w dwóch akcjach europejskich COST: Nano-IBCT (2011-2014) i PERSPECT-H₂O (2012-2016). W drugiej reprezentuje Polskę w Komitecie Sterującym akcji i jest również jej sprawozdawcą finansowym. Był stypendystą grantu dla najlepszych magistrantów i grantu doktorskiego finansowanych przez francuskie Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego, grantu postdoktorskiego ufundowanego przez fundację Carl-Zeiss-Stiftung (5 staży postdoktorskich rocznie). Obecnie jest stypendystą Marie Curie Career Integration Grant (2012-2016).

Dr J. Guthmuller aktywnie uczestniczy w konferencjach międzynarodowych. Wygłosił 17 wykładów, w tym 4 zaproszone, i był autorem 20 plakatów. Współorganizował dwie konferencje międzynarodowe i był recenzentem 15 prac w 6 renomowanych czasopismach naukowych. Od grudnia 2012 jest członkiem Polskiego Towarzystwa Fizycznego.

Dr J. Guthmuller posiada duże doświadczenie w działalności dydaktycznej, które zdobył pracując na czterech uczelniach we Francji, Belgii, Niemczech i Polsce. Już w trakcie studiów doktoranckich w latach 2003-2006 prowadził ćwiczenia z programowania i fizyki dla studentów pierwszego i drugiego roku fizyki na Uniwersytecie Claude Bernard Lyon I we Francji. W latach 2009-2011, prowadził tutoriale z chemii i ćwiczenia z programowania na Uniwersytecie Friedricha Schillera w Jenie. Opiekował się naukowo dwoma stażami, studentów czwartego roku chemii i pracą doktorską Stephana Kupfera z Uniwersytetu Friedricha Schillera w Jenie (2010-2013). Od roku 2012 prowadzi zajęcia dydaktyczne na Politechnice Gdańskiej: wykłady ze wstępu do metod numerycznych, ćwiczenia laboratoryjne z metod numerycznych oraz kieruje trzema pracami magisterskimi i jedną pracą inżynierską na Wydziale Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechniki Gdańskiej.

Podsumowując stwierdzam, że zarówno osiągnięcia naukowe przedstawione w rozprawie habilitacyjnej, jak również pozostałe prace z dorobku dra Julienu Guthmullera reprezentują wysoki poziom badawczy i wnoszą istotny wkład do badań w dziedzinie fizyki molekularnej. Wysoko oceniam również aktywność naukową habilitanta, która obejmuje prezentacje na konferencjach, udział w projektach badawczych i działalność dydaktyczną. Osiągnięcia naukowo-badawcze spełniają warunki określone w ustawie o stopniach i tytule naukowym dla osób ubiegających się o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego (z dnia 14 marca 2003 r. z późniejszymi zmianami). Wnioskuje o przyjęcie rozprawy habilitacyjnej i o dopuszczenie dra Julienu Guthmullera do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

Kraków, dnia 16 października 2014 r.



dr hab. Przemysław Piekarczyk