



Prof. dr hab. Jacek Komasa
Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza
ul. Grunwaldzka 6, 60-780 Poznań
e-mail: komasa@man.poznan.pl, tel. 618 291 281, fax 618 291 505

Poznań, dnia 7 maja 2012 r.

Recenzja rozprawy habilitacyjnej i dorobku naukowego dr Iwony Anusiewicz

1 Informacje ogólne

Dr Iwona Anusiewicz ukończyła studia chemiczne na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego i na podstawie pracy magisterskiej pt. „Badanie kinetyki reakcji hydrogenolizy polichlorobenzenów na katalizatorze palladowym w środowisku zasadowym” otrzymała tytuł magistra. Po odbyciu trzyletnich studiów doktoranckich uzyskała na tymże Wydziale w roku 2004 stopień doktora nauk chemicznych na podstawie rozprawy pt. „Projektowanie i badanie metodami ab initio nietypowych anionów molekularnych”. W czasie studiów doktoranckich nawiązała współpracę z prof. dr. hab. Piotrem Skurskim, który był promotorem wspomnianej rozprawy doktorskiej i z którym do dzisiaj prowadzi badania naukowe. Współpraca ta była również załączkiem tematyki habilitacji dr Anusiewicz. Habilitantka, od roku 2004, jest zatrudniona w Zakładzie Chemii Kwantowej macierzystej uczelni, gdzie zdobyła doświadczenie dydaktyczne prowadząc zajęcia laboratoryjne i proseminaryjne. W roku 2010 jej praca naukowa została wyróżniana zespołową nagrodą rektorską II-go stopnia za osiągnięcia naukowe.

Polem działalności naukowej dr Anusiewicz można określić jest chemia obliczeniowa lub, nieco precyzyjniej, modelowanie molekularne. Do rozwiązywania problemów chemicznych Habilitantka używa istniejących programów komputerowych opartych na mechanice kwantowej i mechanice molekularnej. Zajmuje się badaniem struktury geometrycznej i elektronowej różnych grup

związków. W cyklu publikacji habilitacyjnych skoncentrowała się na dwóch takich grupach. Pierwsza to aniony superhalogenowe czyli związki o niezwykle wysokim powinowactwie elektronowym, a druga to superalkalia czyli związki o niskich potencjałach jonizacji.

Na przedstawioną mi do oceny rozprawę habilitacyjną składa się dziesięć oryginalnych publikacji zebranych pod wspólnym tytułem „Superhalogeny i superalkalia jako związki o ekstremalnych właściwościach fizykochemicznych”, autoreferat, oświadczenia współautorów oraz 10-cio stronicowe omówienie pozostałego dorobku naukowego wraz z bibliografią. Materiały te przygotowane zostały starannie pod względem formy oraz zgodnie z nowymi zaleceniami CK. Rozprawa jest tematycznie spójna a zawarty we wniosku materiał świadczy, że Habilitantka opanowała w odpowiednim stopniu narzędzia obliczeniowe stosowane w swoich badaniach teoretycznych i z powodzeniem używa ich do rozwiązywania problemów chemicznych.

2 Ocena dorobku

Według aktualnie obowiązującej ustawy o stopniach naukowych podstawę oceny osiągnięć Habilitanta stanowią kryteria zawarte w rozporządzeniu Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego (Dz.U. Nr 196, Poz. 1165, z dnia 1 września 2011 roku). W świetle tych kryteriów **moja opinia o osiągnięciach naukowo-badawczych przedstawionych w dokumentacji habilitacyjnej dr Anusiewicz jest pozytywna.** W szczególności

- Habilitantka jest autorem pięciu i współautorem dalszych pięciu artykułów naukowych opublikowanych w latach 2007-2011 w dobrych lub bardzo dobrych czasopismach międzynarodowych znajdujących się w bazie Journal of Citation Reports takich jak np. Journal of Physical Chemistry A, Chemical Physics Letters, czy Molecular Physics. *Impact factor* tych czasopism mieści się w zakresie od 0.8 do 4.3. Publikacje te tworzą monotematyczny cykl poświęcony wspomnianym wcześniej anionom superhalogenowym oraz superalkaliom. Cykl ten pełni rolę „osiągnięcia naukowego” w rozumieniu ustawy o stopniach nauko-

wych. Oświadczenia autorów oraz deklarowany procentowy udział Habilitantki w przygotowaniu tych publikacji nie pozostawia wątpliwości co do jej wiodącego wkładu w tym zakresie.

- Sumaryczny *impact factor* tego cyklu wynosi 22.88 a średni 2.29 na jedną pracę. W odniesieniu do całkowitego dorobku dr Anusiewicz złożonego z 34 publikacji wartości te wynoszą odpowiednio 91.93 i 2.70, a do 21 publikacji wydanych po doktoracie – 52.60 i 2.50. W mojej ocenie jest to wynik bardzo dobry.
- Według danych bazy Web of Science wszystkie publikacje Habilitantki były cytowane ok. 500 razy (bez autocytowań), w tym na publikacje wchodzące w skład habilitacji, a więc pochodzące z lat 2007–2011, przypadają 33 cytowania. Wynik ten pozwala mi stwierdzić, że mamy do czynienia z dorobkiem znaczącym i docenionym przez środowisko naukowe.
- Według tej samej bazy indeks Hirscha dla całego dorobku dr Anusiewicz wynosi 12, co również można uznać za wynik adekwatny do obecnego etapu kariery naukowej Habilitantki.
- Dr Anusiewicz otrzymała dwie nagrody o zasięgu krajowym za działalność naukową. Pierwszą było Stypendium Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej dla młodych naukowców w roku 2004, a drugą – Nagroda PTCh za najlepszą pracę doktorską w roku 2005.
- Do słabych punktów ocenianego wniosku zaliczyłbym brak udziału w krajowych projektach badawczych, choć w dokumentacji wymieniony jest pewien, prawdopodobnie lokalny (brak tu bliższych danych), projekt badawczy, którym Habilitantka kierowała.
- Inną słabością wniosku jest brak referatów wygłoszonych na międzynarodowych lub krajowych konferencjach. Habilitantka ma w dorobku natomiast kilka komunikatów posterowych.

Odnosząc się do dorobku dydaktycznego i popularyzatorskiego Habilitantki oraz jej współpracy międzynarodowej, uważam, że jest on wystarczający do uzyskania pozytywnej opinii.

- Dr Iwona Anusiewicz odbyła jeden roczny i jeden czteromiesięczny zagraniczny staż naukowy w University of Utah, USA. Przy tej okazji brała udział w organizacji konferencji naukowej w Salt Lake City, USA oraz międzynarodowej letniej szkoły chemii teoretycznej w Park City, USA. Wcześniej, jeszcze jako doktorantka, uczestniczyła w organizacji Polsko-Rosyjsko-Ukraińskiej konferencji poświęconej oddziaływaniom molekularnym.
- W ramach Europejskiego Funduszu Społecznego prowadziła kursy doszkalające oraz przygotowała skrypt.
- Recenzowała publikacje dla międzynarodowych czasopism naukowych.
- Sprawowała opiekę naukową nad sześcioma magistrantami.
- Prowadziła zajęcia z chemii kwantowej, chemii fizycznej i informatyki w ramach pełnego pensum dydaktycznego.

3 Podsumowanie

Po analizie rozprawy i dorobku naukowego dr Iwony Anusiewicz stwierdzam, że jest ona dojrzałym badaczem, dobrze przygotowanym do samodzielnej pracy naukowej, organizacyjnej i dydaktycznej. Legitymuje się poważnym dorobkiem naukowym i uznaniem środowiska naukowego.

Odnosząc się do wymogów ustawowych, nie mam wątpliwości, że osiągnięcie Habilitantki, jakim jest przedstawiony do oceny jednotematyczny cykl dziesięciu oryginalnych publikacji, stanowi „znaczny wkład autora” w rozwój chemii kwantowej oraz, że w tej dziedzinie habilitantka „wykazuje się istotną aktywnością naukową”. Uważam więc, że przedstawiona mi do oceny rozprawa habilitacyjna spełnia wymagania Ustawy, a cały dorobek naukowy kandydatki uzasadnia nadanie jej stopnia doktora habilitowanego.

J. Kowal