



prof. dr hab. Wojciech Macyk
Grupa Fotokatalizy
Zakład Chemii Nieorganicznej
Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński
ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków
✉ macyk@chemia.uj.edu.pl
☎ (+48)126862494
🌐 www.fotokataliza.pl; www.photocatalysis.eu

Kraków, 10.10.2023

Ocena dorobku w postępowaniu habilitacyjnym Pani dr Dagmary Stefańskiej

Pani dr Dagmara Stefańska, obecnie adiunkt w Oddziale Spektroskopii Optycznej Instytutu Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych Polskiej Akademii Nauk we Wrocławiu, jest absolwentem Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego (studia magisterskie zakończone w 2011 roku). W styczniu 2017 roku uzyskała stopień doktora nauk chemicznych broniąc rozprawę pt. *Synteza oraz właściwości spektroskopowe krzemianów i glinokrzemianów domieszkowanych jonami Eu^{3+} , Ce^{3+} , Eu^{2+}* przygotowaną w Oddziale Spektroskopii Optycznej Instytutu Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych Polskiej Akademii Nauk. Promotorem pracy był prof. dr hab. Przemysław Dereń. Pani dr Stefańska zatrudniona jest w INTiBS PAN od początku 2012 roku – przez pierwsze dwa lata na stanowisku technicznym jako chemik, następnie od stycznia 2014 do marca 2017 roku na stanowisku asystenta, aż wreszcie, po obronie doktoratu do chwili obecnej jako adiunkt.

Już w czasie studiów na Uniwersytecie Wrocławskim Pani Stefańska zainteresowała się materiałami emitującymi światło i pozostała wierna tej tematyce do chwili obecnej, o czym świadczą praca magisterska pt. *Spektroskopowe badania ceramiki na bazie $Lu_2O_3:Tb$* wykonana pod kierunkiem prof. dr hab. Eugeniusza Zycha, wspomniana już rozprawa doktorska, oceniane osiągnięcia habilitacyjne, a także liczne inne publikacje Habilitantki. Zaskakuje jednak fakt, że z przedstawionych dokumentów nie wynika jednoznacznie jaki jest tytuł osiągnięcia habilitacyjnego. Czy jest nim: *Mechanizmy procesów luminescencji zachodzących w wybranych nieorganicznych i hybrydowych perowskitach* (ten tytuł widnieje na stronie tytułowej Autoreferatu oraz w Wykazie osiągnięć naukowych (Załącznik 4a)), czy może: *Charakterystyka spektroskopowa związków o strukturze typu perowskitu do zastosowania w optoelektronice* (tytuł osiągnięcia naukowego przedstawiony w p. 4.1 Autoreferatu). Rozwiązania tego problemu nie ułatwia dokumentacja w języku angielskim, w której odnaleźć można również dwa tytuły – odpowiednio: *Mechanisms of luminescence processes occurring in selected inorganic and hybrid perovskites* oraz: *Spectroscopic characterization of compounds with perovskite type structure for use in optoelectronics*.

Niezależnie od tego, jak formalnie brzmi tytuł osiągnięcia habilitacyjnego, jest ono zbiorem dziesięciu prac (H1–H10) opublikowanych w czasopismach z listy filadelfijskiej. Publikacje pojawiły się w dobrych i bardzo dobrych czasopismach z listy filadelfijskiej o współczynnikach oddziaływania (*impact factor*) od 4,39 do 9,811. Wydawcami czasopism są ACS (czterokrotnie *Chemistry of Materials*), MDPI (dwukrotnie *Molecules*), Elsevier (dwukrotnie *Journal of Alloys and Compounds* oraz *Ceramics International*), a także RSC (*Dalton Transaction*). Jedna z nich (H5) to monoautorska praca oryginalna. W artykułach H1-H6 dr Stefańska jest pierwszym i zarazem korespondencyjnym autorem, zaś w czterech ostatnich, H7-H10, nie jest ani autorem korespondencyjnym, ani autorem na wyróżnionej pozycji, co świadczy o mniejszym udziale Habilitantki w powstaniu tych prac. Artykuły H6-H10 powstały w wyniku współpracy między innymi z prof. dr. hab. Mirosławem Mączką, który jest autorem korespondencyjnym wszystkich tych prac, z czego w H6 wspólnie z Habilitantką. Prof. Mączka w swoim oświadczeniu o wkładzie w powstanie wszystkich publikacji H6-H10 napisał, że jego udział polegał na „zaplanowaniu wszystkich eksperymentów, przygotowaniu koncepcji pracy i podziale obowiązków pomiędzy wszystkich współautorów” (moje podkreślenie). Oświadczenie to pozostaje w sprzeczności z deklaracją Habilitantki, która określając swój wkład w powstanie publikacji H6 pisze: „Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na zaplanowaniu i wykonaniu wszystkich eksperymentów dotyczących właściwości luminescencyjnych” (moje podkreślenie). Podobne sformułowania pojawiają się przy opisie udziału w powstaniu publikacji H7-H10, w których Pani Stefańska planowała i wykonywała pomiary dotyczące procesów liniowych optycznie. Uważam, że zarówno sprawa tytułu osiągnięcia jak i wykluczające się oświadczenia dotyczące publikacji H6-H10 powinny zostać wyjaśnione przez Habilitantkę w czasie spotkania z Komisją Habilitacyjną.

Przedstawione w cyklu publikacyjnym osiągnięcia Habilitantki obejmują opis i interpretację właściwości spektroskopowych (elektronowych widm emisyjnych i absorpcyjnych) materiałów o strukturze perowskitu. Są to zarówno materiały czysto nieorganiczne, w których pierwiastki A i B struktury ABX_3 (lub w przypadku tak zwanych podwójnych perowskitów $A_2BB'X_6$) są metalami, jak również układy hybrydowe, nieorganiczno-organiczne, w których zamiast kationów metali pojawiają się proste kationy organiczne. Dodatkowo, materiały te mogą być domieszkowane jonami metali bloku *d* lub *f*. Pierwsze publikacje, H1-H4, dotyczą właśnie perowskitów podwójnych, Ba_2MgWO_6 oraz La_2MgTiO_6 domieszkowanych odpowiednio jonami europu oraz wanadu, chromu lub manganu. Autorka szczegółowo zbadała silną zależność temperaturową właściwości emisyjnych tych materiałów, która może stanowić podstawę konstrukcji termometrów luminescencyjnych działających w różnych zakresach temperatur – od kilkudziesięciu do kilkuset stopni Kelwina. Prace H1-H4 cechuje wnikliwa analiza widm emisyjnych połączona z konstrukcją diagramów energetycznych możliwych przejść. Ponieważ sam nie prowadzę badań w podobnej tematyce, zainteresowały mnie metody konstruowania tych diagramów, w szczególności przebieg parabol przypisanych poszczególnym termom. Autorka w swoich pracach nie wyjaśnia jednak metodologii budowania modeli, które odnaleźć możemy na

przykład na Rys. 6 i 8 Autoreferatu. Realizacja badań opisanych w artykułach H1-H4 pozwoliła nie tylko opisać zjawiska związane z przeniesieniem energii i luminescencją, ale również przyczyniła się do opracowania materiałów o bardzo przydatnych właściwościach funkcjonalnych, chociażby w termometrii.

Samodzielnie przygotowana praca H5 to pierwszy (nie chronologicznie, ale w zestawieniu) z cyklu artykułów (H5-H10), w których Habilitantka podejmuje się opisu właściwości luminescencyjnych perowskitów hybrydowych. Możliwość zastosowania kationów organicznych w perowskitach otwiera możliwości dostrajania właściwości strukturalnych i spektroskopowych tej grupy materiałów. Dodatkowo w artykule H5 wykorzystany został dość nietypowy anion, jakim jest anion fosforanowy(I). Habilitantka dostrzegła korelację pomiędzy odkształceniem oktaedrów $[MnO_6]$ spowodowanych różnymi kationami organicznymi a właściwościami luminescencyjnymi podfosforynów. W kolejnych pracach, H6-H10, opisano luminescencję materiałów $APbX_3$, gdzie $X = Cl^-, Br^-, I^-$, zaś kationem A był kation azyrydyniowy lub metylohydrazoniowy. W przypadku tych grup materiałów czynnikiem dostrajającym właściwości spektroskopowe jest anion halogenku. Również dla tej grupy materiałów scharakteryzowano temperaturową zależność luminescencji.

Przedstawiony do oceny cykl publikacyjny pokazuje, że Pani dr Dagmara Stefańska posiada duże kompetencje w badaniach właściwości luminescencyjnych perowskitów oraz innych materiałów nieorganicznych i hybrydowych. W swoich pracach nie tylko wyjaśnia zjawiska od wzbudzenia, poprzez transfer energii, po procesy wygaszania stanów wzbudzonych, ale wskazuje również metody dostrajania właściwości luminescencyjnych umożliwiające uzyskanie nowych luminoforów o pożądanych właściwościach funkcjonalnych. Świadczą o tym również osiągnięcia wdrożeniowe Habilitantki, do których odniosę się w dalszej części recenzji.

Mimo, że wyniki prac zostały opublikowane w recenzowanych czasopismach, nie udało się uniknąć pewnych zauważalnych błędów i niedociągnięć. Na kilka z nich chciałbym tutaj zwrócić uwagę:

1. Określenie *detekcja temperatury*, które Habilitantka stosuje w Autoreferacie, nie jest poprawne. Termometr – w tym przypadku bazujący na silnej zależności widm fluorescencyjnych od temperatury (w określonych jej zakresach) – pozwala nie wykrywać, ale mierzyć temperaturę, zatem zamiast niefortunnego określenia należałoby użyć sformułowania *miar temperatury*.
2. Niefortunne, a może mało staranne, jest również określenie *compounds* odnoszące się do materiałów (*materials*). Opracowywane luminofory z pewnością są materiałami, ale niekoniecznie związkami chemicznymi.
3. Nagminnym błędem jest nieuzasadnione nadużywanie jednostek umownych (*arbitrary units; a.u.*). Absorbancja, znormalizowana intensywność, reflektancja (*reflectance*) są wielkościami bezwymiarowymi, jednoznacznie zdefiniowanymi, dlatego stosowanie jednostek *a.u.* jest w tych przypadkach błędne.

4. W tekstach publikacji pojawiają się niepoprawne określenia takie jak: *reflectance absorption spectra* (H4), *diffuse reflection spectra* (H6) itp.
5. Poważne błędy popełnione zostały przy wyznaczaniu energii przerwy wzbronionej materiałów półprzewodnikowych. Habilitantka konsekwentnie pisze, że do wyznaczania tych wartości wykorzystywana była funkcja Kubelki-Munka, podczas gdy w rzeczywistości stosowano przekształcenie Tauca dla półprzewodników o przerwie prostej. Funkcja Kubelki-Munka to odpowiednik absorbancji, wyznaczony jednakże z widm DRS, a nie transmisyjnych, zaś do wyznaczenia energii przerwy wzbronionej używano każdorazowo przekształcenia Tauca. Ekstrapolacja liniowej części funkcji uzyskanej z tego przekształcenia pozwala wyznaczyć szerokość przerwy wzbronionej, jednak analiza taka bazująca na ekstrapolacji linii prostej do przypadkowych, niezerowych wartości funkcji z pewnością nie jest poprawna (np. H4 Fig. S5, H6 Figs. S2, S3, H7 Fig. S14, H9 Fig. S14 itd.). W publikacjach Habilitantki nie znalazłem wyjaśnienia dlaczego domyślnie przyjmuje, że wszystkie badane przez nią półprzewodniki mają przerwę prostą.
6. Rysunki przedstawiające względne energie krawędzi pasm, jak na przykład H5 Fig. 3b, zakładają symetryczne „przesuwanie” krawędzi pasm walencyjnego i przewodnictwa. Moim zdaniem nie ma podstaw do tego typu założeń.
7. W Autoreferacie Habilitantka pisze: „Stwierdzono, że przy tym wzbudzeniu, elektrony z poziomów walencyjnych matrycy zostają przeniesione na poziomy wzbudzone grupy [TiO₆]. Prowadzi to do generacji przejść typu przeniesienia ładunku (CT) Ti⁴⁺→O²⁻ oraz nieradiacyjnego transferu energii na poziomy emisyjne ¹T₂ jonów V⁵⁺ oraz ²E_g jonów Cr³⁺.” Absorpcyjne przejście CT zachodzi w przeciwnym kierunku (O²⁻→Ti⁴⁺), być może jednak chodziło tu o przejścia emisyjne, Ti³⁺→O⁻. Istotą opisywanych zjawisk są tu jednak procesy przekazania energii na poziomy emisyjne domieszek, których wydajność istotnie zależy od temperatury. Ponieważ energia tych stanów jest wyższa od energii emisji oktaedrów [TiO₆], (por. np. Rys. 6 i 8 w Autoreferacie lub Rys. 5 w H4) wydaje się, że zjawiska te nie podlegają regule Kasha.

Aktualnie baza *Scopus* wyświetla 58 dokumentów autorstwa Pani dr Dąmary Stefańskiej, jej indeks Hirscha wynosi 19, a liczba cytowań – ponad 1050. Sumaryczny *impact factor* wszystkich publikacji Habilitantki wynosi obecnie około 262, a średni IF publikacji wchodzących w skład osiągnięcia habilitacyjnego osiągnął wartość 7,05 przy niemal 36 cytowaniach na publikację. Są to parametry bardzo dobre. Habilitantka publikuje w dobrych i bardzo dobrych czasopismach, jednak w tych najlepszych publikuje jedynie z bardziej doświadczonymi naukowcami (na przykład publikacje w *Journal of Material Chemistry* powstały we współpracy z Profesorem Mączką).

Ważnym aspektem pracy naukowej jest umiejętność skutecznego pozyskiwania i realizacji projektów badawczych. Habilitantka uzyskała finansowanie swoich badań w ramach projektów SONATA 16 (NCN; 2021-2024; *Hybrydowe perowskity organiczno-nieorganiczne jako termometry luminescencyjne o wysokiej czułości*), LIDER XII (NCBiR;

Opracowanie technologii wytwarzania kompozytów emitujących światło białe o wysokim współczynniku CRI dedykowanych do oświetlenia LED), a jeszcze w czasie doktoratu zdobyła projekt PRELUDIUM. Ponadto zdobywa finansowanie w ramach programów własnych INTiBS PAN oraz jest wykonawcą innych projektów NCN i NCBiR. Aktywność i skuteczność zdobywania środków na badania, konieczne w prowadzeniu samodzielnych badań, należy zatem ocenić bardzo pozytywnie.

Pani dr Dagmara Stefańska jest współautorką trzech krajowych zgłoszeń patentowych. Uwagę zwraca współpraca z otoczeniem gospodarczym, obejmująca opracowywanie i skalowanie syntez materiałów luminescencyjnych oraz komercjalizację tych osiągnięć.

Najważniejszymi wyróżnieniami Pani Doktor (obok uzyskania finansowania projektów NCN i NCBiR) są wyróżnienia w konkursach Innowacje 2012 i Innowacje 2013 za wynalazki (Targi Technicon Innowacje, Gdańsk 2012 i 2013), a także tytuł laureata grantu sponsorowanego przez JECS-TRUST (Europejskie Towarzystwo Ceramiczne) przeznaczonego dla młodych naukowców za dotychczasowe osiągnięcia naukowe oraz możliwość zaprezentowania wyników swoich badań na konferencji *10th International Workshop on Advanced Ceramics (IWAC07)* w 2016 roku w Limoges we Francji.

Pani dr Dagmara Stefańska prowadziła swoje prace badawcze głównie w ramach współpracy krajowej. Współautorami jej publikacji są pracownicy INTiBS PAN we Wrocławiu i Politechniki Wrocławskiej, ale także naukowcy z Uniwersytetu Wileńskiego. Po doktoracie Habilitantka odbyła krótkie staże naukowe na Uniwersytecie w Gandawie pod kierunkiem Prof. Philippe Smeta (lata 2018-2019) oraz w Instytucie Technologii Materiałów Elektronicznych w Warszawie (2018). Szkoda, że Habilitantka nie zdecydowała się na odbycie dłuższego stażu podoktorskiego, który z pewnością przyczyniłby się do poszerzenia tematyki badawczej i warsztatu naukowego. W ramach kooperacji z różnymi ośrodkami Pani Stefańska uczestniczyła w powstaniu 25 publikacji, co świadczy o dużych możliwościach nawiązywania efektywnej współpracy. Współpraca ta umożliwiła wykorzystanie różnych technik badawczych, zarówno eksperymentalnych jak i obliczeniowych.

Pani dr Dagmara Stefańska prezentowała wyniki swoich badań na konferencjach międzynarodowych i krajowych. Były to wystąpienia ustne jak i prezentacje plakatowe. Uważam, że w tym zakresie warto byłoby zwiększyć jednak aktywność w obszarze międzynarodowym, gdyż większość wystąpień ustnych dotyczy konferencji krajowych.

Pracując w instytucie Polskiej Akademii Nauk Pani dr Stefańska miała ograniczone możliwości realizacji na polu dydaktycznym. Na uwagę zasługuje jednak opieka nad praktykantami (ponad 20), magistrantami (2) i doktorantami (2 w roli promotora pomocniczego), prowadzenie seminariów magisterskich (w sumie 22 h) oraz wykładów (2 h) i warsztatów popularnonaukowych (około 20 h). Pani Doktor recenzowała manuskrypty (około 20) dla kilku czasopism oraz projekty naukowe jako ekspertka FNP.

Przedstawiony przez Panią dr Dagmarę Stefańską monotematyczny cykl publikacji spełnia wymogi zwyczajowe i ustawowe konieczne do uzyskania stopnia doktora habilitowanego. Dotychczasowa działalność naukowa, w tym publikacyjna, zdolność zdobywania środków na prowadzenie badań, umiejętność nawiązywania współpracy, a także



prof. dr hab. Wojciech Macyk

Grupa Fotokatalizy, Zakład Chemii Nieorganicznej

Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński

ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków

✉ macyk@chemia.uj.edu.pl, ☎ (+48)126862494, 🌐 www.fotokataliza.pl; www.photocatalysis.eu

doświadczenie w opiece nad studentami i doktorantami świadczą o osiągnięciu przez Panią Stefańską samodzielności naukowej. Uważam, że osiągnięcia Habilitantki odpowiadają wymaganiom określonym w art. 219 ust. 1 pkt 2 Ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20 lipca 2018 r. (z późniejszymi zmianami). Uważam jednocześnie, że rozmowa Komisji Habilitacyjnej z Kandydatką pozwoli rozwiązać wątpliwości, które przedstawiłem w niniejszej recenzji.