

Wydział Chemii
Kierownik Zakładu Fizyki Chemicznej
Kierownik Zespołu Obrazowania Ramanowskiego
https://zor.chemia.uj.edu.pl/en_GB/news



UNIwersytet JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

Prof. dr hab. Małgorzata Barańska
ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków
tel. +48 12 686 2389
e-mail: m.baranska@uj.edu.pl

Jagiellońskie Centrum Rozwoju Leków
Kierownik Grupy Badawczej Spektroskopii Ramanowskiej
<http://www.jcet.eu/>

Kraków, 8 lutego 2024

OCENA

dorobku naukowego i rozprawy habilitacyjnej Pani Dr inż. Moniki Trzebiatowskiej

*Polimery koordynacyjne oparte na ligandach z wiązaniami wielokrotnymi:
przejścia fazowe porządek-nieporządek oraz właściwości zależne od temperatury*

PODSTAWY FORMALNE

Dnia 5 stycznia 2024 otrzymałam drogą mailową dokumentację wniosku habilitacyjnego Pani Dr inż. Moniki Trzebiatowskiej, adiunkta w Instytucie Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN we Wrocławiu. Jej podstawą był wniosek Pani Doktor do Rady Doskonałości Naukowej datowany na 9 września 2023 o przeprowadzenie postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie Nauk Ścisłych i Przyrodniczych w dyscyplinie Nauki Chemiczne. Uchwałą Rady Naukowej Instytutu Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN z dnia 8 grudnia 2023 roku, została powołana komisja habilitacyjna w tym przewodzie, gdzie objęłam funkcję recenzenta.

Swoje osiągnięcie naukowe będące podstawą ubiegania się o nadanie stopnia doktora habilitowanego Pani Doktor Trzebiatowska określiła jako cykl powiązanych tematycznie publikacji pod wspólnym tytułem: *Polimery koordynacyjne oparte na ligandach z wiązaniami wielokrotnymi: przejścia fazowe porządek-nieporządek oraz właściwości zależne od temperatury*.

Niniejsza opinia została przygotowana zgodnie z zasadami przeprowadzania postępowania habilitacyjnego obowiązującymi w Instytucie Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN we Wrocławiu, z *ustawą Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* z dnia 20 lipca 2018 r. (z późniejszymi zmianami), *ustawą o Polskiej Akademii Nauk* z dnia 30 kwietnia 2010 r. (z późniejszymi zmianami) oraz *ustawą Kodeks Postępowania Administracyjnego* z dnia 14 czerwca 1960 r. (z późniejszymi zmianami).

W szczególności, podstawą prawną tego postępowania jest art. 221 ust. 10 z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2021 r. poz. 478 zm.). Zgodnie z art. 221, pkt.8, *Recenzenci, w terminie 8 tygodni od dnia doreczenia im wniosku, oceniają, czy osiągnięcia naukowe osoby ubiegającej się o stopień doktora habilitowanego odpowiadają wymaganiom określonym w art. 219 ust. 1 pkt 2, i przygotowują recenzje.*

Według *Poradnika habilitacji* wydanego przez Radę Doskonałości Naukowej, aktualizacja 5 sierpnia 2021, *należy jednak przyjąć, że od recenzentów można oczekiwać dokonania oceny spełnienia wszystkich przesłanek warunkujących nadanie tego stopnia, w tym przede wszystkim, czy wskazane w dokumentacji wniosku informacje o aktywności naukowej albo artystycznej, o której mowa w art. 219 ust. 1 pkt 3 p.s.w.n., są istotne w ramach danej dyscypliny.*

Niniejsza recenzja została przygotowana opierając się na w/w dokumentach i szczegółowo odnosi się do Artykułu 219, ust. 1 (pkt 2 i 3 zostały wytluszczone): 1. Stopień doktora habilitowanego nadaje się osobie, która: 1) posiada stopień doktora; **2) posiada w dorobku osiągnięcia naukowe albo artystyczne, stanowiące znaczny wkład w rozwój określonej dyscypliny, w tym co najmniej: a) 1 monografię naukową wydaną przez wydawnictwo, które w roku opublikowania monografii w ostatecznej formie było ujęte w wykazie sporządzonym zgodnie z przepisami wydanymi na podstawie art. 267 ust. 2 pkt 2 lit. a, lub b) 1 cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych opublikowanych w czasopiśmie naukowych lub w recenzowanych materiałach z konferencji międzynarodowych, które w roku opublikowania artykułu w ostatecznej formie były ujęte w wykazie sporządzonym zgodnie z przepisami wydanymi na podstawie art. 267 ust. 2 pkt 2 lit. b, lub c) 1 zrealizowane oryginalne osiągnięcie projektowe, konstrukcyjne, technologiczne lub artystyczne;** 3) wykazuje się istotną aktywnością naukową albo artystyczną realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury, w szczególności zagranicznej.

PODSTAWOWE DANE O HABILITANTCE

Pani Dr inż. Monika Trzebiatowska jest adiunktem w Instytucie Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN we Wrocławiu od roku 2015. W okresie 2007-2011 pracowała na stanowisku asystenta w grupie Pani Prof. Magdaleny Szostak w Instytucie Chemii Fizycznej i Teoretycznej na Wydziale Chemii Politechniki Wrocławskiej.

Stopień doktora nauk chemicznych uzyskała w 2007 roku, a promotorem pracy był Pan Prof. Jan Baran z Instytutu Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN we Wrocławiu. Tematem pracy były *Korelacje struktur dyfrakcyjnych z widmami oscylacyjnymi kompleksów krystalicznych zawierających aminokwasy, kwasy nieorganiczne i halogenki metali.*

Pani Doktor odbyła dwa zagraniczne staże podoktorskie, jeden w grupie Prof. T. Feurera w Institute of Applied Physics, University of Bern, Berno, Szwajcaria (luty 2012 - listopad 2012) oraz drugi w grupie Prof. J. Swartsa, Department of Chemistry, University of Free State, Bloemfontein, Republika Południowej Afryki. (luty 2010 - grudzień 2021). Podczas stażu Habilitantka prowadziła badania kryształów organicznych stosując spektroskopię w zakresie THz, a także projektowała i produkowała katalizatory 2D na bazie metalocenów i

plytek krzemowych. Efektem tego są publikacje w *Nanoscale*, 2012, 4, 541-546 oraz w *Journal of Organometallic Chemistry* 2013, 745-746, 393-403, w tej drugiej Habilitantka jest na pierwszym miejscu wśród autorów. Odbycie przez Habilitantkę staży naukowych oraz ich udokumentowanie pokazuje, że kryterium *istotnej aktywności naukowej realizowanej w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury, w szczególności zagranicznej zostało formalnie spełnione.*

OSIĄGNIĘCIE HABILITACYJNE

Na osiągnięcie habilitacyjne zatytułowane *Polimery koordynacyjne oparte na ligandach z wiązaniami wielokrotnymi: przejścia fazowe porządek-nieporządek oraz właściwości zależne od temperatury* składa się 8 publikacji z lat 2019-2021. Prace opublikowano w czasopismach o średnim współczynniku oddziaływania (*impact factor*), tj. ok. 4,5 (sumarycznie to ok. 36). Analizując cykl prac habilitacyjnych można stwierdzić, że w sześciu z nich Habilitantka jest pierwszym autorem i jednocześnie korespondencyjnym, jedna z tych prac jest monoautorska. Pozostałe dwie prace z cyklu gdzie Pani Trzebiatowska jest na dalszej pozycji wśród autorów zostały wykonane pod kierunkiem Pana Prof. Mirosława Mączki, w zespole którego Habilitantka pracuje. Oświadczenia współautorów, w tym Pana Prof. M. Mączki, nie budzą wątpliwości co do wiodącej roli Pani Dr Trzebiatowskiej w tych pracach. ***Z formalnego punktu widzenia nie mam żadnych zastrzeżeń, a wręcz jest to wzorcowy przykład przygotowania cyklu publikacji habilitacyjnych.***

Udział Habilitantki w pracach H1-H8 jest jasno opisany i polegał on zasadniczo na syntezie kryształów do badań, wykonaniu pomiarów widm oscylacyjnych, również w funkcji temperatury, analizie i interpretacji widm, sporządzaniu manuskryptów i ich redakcji.

Prace Habilitantki poświęcone są systematycznemu badaniu materiałów polimerów koordynacyjnych posiadających ligandy z wiązaniami wielokrotnymi, ich struktury i przejść fazowych, i objęły azydki (H1, H2, H5), cyjanki (H3, H4, H6) oraz dicyjanki (H7, H8).

Poniżej odnoszę się do wybranych zagadnień z prac cyklu habilitacyjnego i najważniejszych osiągnięć Habilitantki.

Związki badane przez Habilitantkę to perowskity (H1, H2), perowskity podwójne (H3, H5, H6) i nieperowskity (H4, H7, H8). W pracy H1 Habilitantka zbadała strukturę krystaliczną związku $\text{DMACd}(\text{N}_3)_3$ w fazie wysokotemperaturowej i niskotemperaturowej. Podobnie zbudowane kompleksy DMA- i TeMA w sieci $\text{Mn}(\text{N}_3)_3$ były przedmiotem badań pracy H2. W pracy H3 przeanalizowano strukturę i przejścia fazowe grupy formamidynocyjanek o wzorze $\text{FA}_2\text{MK}(\text{CN})_6$, $\text{M}=\text{Co}$, Fe . Wykazano m.in., że pomimo niskiej symetrii trójskośnej koordynacja jonów metali trójwartościowych jest zaskakująco regularna i tylko nieznacznie odbiega od ośmiościanu. Podobną strukturę krystaliczną wyznaczono dla materiału TeMAMCrN_3 , gdzie $\text{M}=\text{Na}^+$ lub K^+ (H5). Oba związki są izostrukturalne, a struktura krystaliczna zmienia się z regularnej Pa-3 na Fm-3m pod wpływem ogrzewania. W pracy H6 zbadano grupę cyjanków o architekturze podwójnego perowskitu, zauważono, że w próbkach MA, DMA-, TMA i TeMA zachodzą przejścia fazowe z C2/c (I4/m w TeMA)

do $Fm-3m$, podczas gdy struktura próbki DMA pozostaje taka sama. W przypadku cyjanków pirolidynowych $\text{Pyr}_2\text{KM}(\text{CN})_6$, gdzie $M=\text{Co}, \text{Fe}$, pomimo tej samej stechiometrii co cyjanki podwójne, symetria kryształów jest inna za względu na wielkość cząsteczki *Pyr* i przypomina filarowo-warstwowe struktury (H4). Dla dicyjanamidów z objętościowym kationem BeTriMe zauważono inne upakowanie (H7), tj. warstwowe z mostkami M-dca równoległe do płaszczyzn (110), atomy tlenu koordynują do kationów M^{2+} , a kationy BeTriMe^+ znajdują się między warstwami, i tworzy się układ mieszany, mostkowy i niemostkowy dca wokół jonu M^{2+} . Praca H8 opisuje strukturę BeTriMe-Cd-dca i przejście fazowe w temperaturze poniżej T pokojowej. W/w pracach diskutowany jest wpływ podstawnika w sieci, siła i kierunkowość wiązań wodorowych na przejścia fazowe oraz procesy dynamiczne vs nieporządek statyczny. Stwierdzono m.in. że mechanizm przejść fazowych w badanych kryształach (H4, H5, H7) był zdominowany przez nagłe uporządkowanie wiązań wodorowych podczas obniżania temperatury. Związek BeTriMeCd wykazywał silną emisję, a kolor i intensywność tej emisji zależał od temperatury, co potwierdziło potencjał wykorzystania go jako bezdotykowy termometr w zakresie 80-250K. W porównaniu z termometrami opartymi na Eu czy Tb, właściwości tego nowego materiału są podobne.

Pomiary i analizę prowadzono głównie w oparciu o widma oscylacyjne, gdzie pasma $\text{C}\equiv\text{N}$ i C-N są dobrze widoczne, więc zmiany długości czy geometrii angażujące te grupy mogą być precyzyjnie śledzone. Wybór metody badawczej był odpowiedni i pozwolił na uzyskanie wiarygodnych wyników.

Podsumowując, praca habilitacyjna Pani Doktor objęła szereg nowych materiałów opartych na ligandach zawierających wiązanie wielokrotne, z których większość krystalizuje w architekturze przypominającej perowskit. Po raz pierwszy opisano 5 kryształów, przeprowadzono badania procesów dynamicznych typu porządek-nieporządek. Najważniejsze osiągnięcia obejmują: i) syntezę nowych materiałów, tj. perowskitów na bazie cyjanku formamidowego, cyjanków pirolidynowych i Cd-dicyjanomidu banzylotrimetyloamoniowego, ii) wyjaśnienie przejść fazowych perowskitów azydkowych i cyjankowych, iii) wyjaśnienie wpływu wiązania wodorowego, geometrii kationu organicznego i metalu w obrębie sieci na przejścia fazowe, iv) odkrycie porządku polarnego w materiale na bazie dicyjanamidu o właściwościach optycznych termometru. Prace te wnoszą nową wiedzę na temat perowskitów, ich struktury i przemian. Można zatem stwierdzić, że recenzowana praca habilitacyjna wnosi **znaczny wkład w rozwój dyscypliny nauki chemicznej**.

DZIAŁALNOŚĆ DYDAKTYCZNA I ORGANIZACYJNA

Pani Doktor pracując na Politechnice Wrocławskiej jako nauczyciel akademicki zaangażowana była w działalność dydaktyczną w ramach swego pensum. Prowadziła zajęcia z fizyki i chemii fizycznej, nie podano jednak jakiego typu były to zajęcia. Stworzyła platformę e-learningową dla PW. Sprawowała opiekę nad studentami realizującymi prace licencjackie.

Recenzowała prace w międzynarodowych czasopismach naukowych.

DOROBEK NAUKOWY

Pani Doktor jest autorem 45 prac z listy JCR i autorem rozdziału w książce „Chemia Fizyczna t.3”, PWN. Po doktoracie opublikowała 37 prac. Indeks Hirscha Habilitantki (15) świadczy o tym, że spora część tych prac jest często cytowana. Sumaryczna liczba cytowań wszystkich prac wynosi ok. 550 i jest to wysoki wskaźnik. Większość publikacji powstało po doktoracie i w wielu z nich Pani Doktor jest pierwszym autorem. To pokazuje znaczący wkład Habilitantka w publikowane prace, realizowane często w większym zespole interdyscyplinarnym.

Habilitantka ma na swym koncie szereg wystąpień na krajowych i międzynarodowych konferencjach.

Za swą działalność naukową otrzymała kilka nagród, w tym stypendia na odbycie zagranicznych staży naukowych oraz na wyjazdy konferencyjne.

PODSUMOWANIE

Jak zawsze dokonując oceny dorobku habilitacyjnego, oprócz formalnego odniesienia się do wymogów ustawowych, w moim odczuciu należy zwrócić też uwagę, czy Habilitantka jest gotowa prowadzić samodzielnie pracę naukową. Pani Doktor pracowała w kilku zespołach naukowych, w Polsce i za granicą, co daje jej dobre, szerokie doświadczenie zarówno naukowe jak i organizacji pracy. Brała udział w projektach we współpracy z polskimi i zagranicznymi centrami naukowymi. To świetnie rokuje na przyszłość, można przypuszczać, że dalej będzie szeroko współpracowała naukowo. Jak dotąd Habilitantka nie kierowała własnym grantem badawczym, nie wiadomo czy podejmowała próby zdobycia grantu, bo choć pisze w Autoreferacie o „sporządzaniu wniosków o granty” to nie jest jednoznaczne czy wnioskuje o nie sama. Była wykonawcą w kilku, brak informacji kto był kierownikiem tych grantów. Myślę więc, że jest gotowa by podjąć samodzielną pracę naukową, otwierając się na nowe wyzwania, realizując nowe pomysły, starając się o ich finansowanie.

Dorobek naukowy Habilitantki oceniam wysoko, opublikowane publikacje mają znaczący współczynnik oddziaływania. Są to prace w większości wieloautorskie, ale w znakomitej większości z nich ma ona wiodącą rolę jako pierwszy i korespondencyjny autor.

Pani Doktor była opiekunem kilku prac licencjackich, więc ma już doświadczenie w kierowaniu pracą naukową młodszych współpracowników.

Ocena dorobku naukowego, w tym habilitacyjnego, jednoznacznie wskazuje, że Habilitantka ma swój **znaczący wkład w rozwój dyscypliny nauki chemiczne**.

Realizując staże naukowe na University of Bern oraz University of Free State, którego efektem są już publikacje, Habilitantka **wykazala istotną aktywność naukową realizowaną w więcej niż jednej uczelni**.

Biorąc pod uwagę fakt, iż jak dotąd nie kierowała żadnym grantem badawczym wnioskuje o zaproszenie Habilitantki na posiedzenie Komisji Habilitacyjnej, by podyskutować o dalszych planach badawczych Habilitantki i szukaniu środków na ich realizację.

Podsumowując muszę dodać, że Autoreferat Pani Dr Trzebiatowskiej został napisany niezbyt starannie, pojawiają się w nim nieobjaśnione skróty, określenia niepoprawne i żargonowe, a ponieważ strony nie są ponumerowane więc trudno mi je przytoczyć dokładnie (np. „mostki cyjanowe zmieniają swoje położenie pasm”, „mostki dca wykazują duże przesunięcie niższych częstości i prawie wszystkie te pasma łączą się w singlety”, „narzędzie do mikrosondowania do opisu zmian morfologicznych”, „zespołowi THz udało się opracować ulepszony zestaw THz”). Nie umniejsza to jednak wagi naukowej tej pracy, więc tylko pozostaje mi zwrócić na to uwagę Habilitantki.

Podsumowując, osiągnięcie habilitacyjne Pani Dr inż. Moniki Trzebiatowskiej jest znaczące i **spełnia wymagania ustawowe** (*Ustawa z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, ze zmianami Dz. U. z 2021 r. poz. 478*) na stopień doktora habilitowanego. Stąd, **popieram wnioski o nadanie Jej stopnia doktora habilitowanego** i wnoszę do Rady Naukowej Instytutu Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN we Wrocławiu o nadanie Pani Doktor stopnia doktora habilitowanego.

