



Warszawa, 17 lipca 2019

(1) Ocena osiągnięcia naukowego dr Katarzyny N. Jarzębskiej zatytułowanego: „**Na styku spektroskopii i krystalografii – badania fizykochemiczne wybranych fotoaktywnych kompleksów koordynacyjnych.**”

Na osiągnięcie przedstawione do oceny składa się 9 prac opublikowanych w latach 2013-2018 w uznanych czasopismach naukowych o średnim czynniku wpływu (ang. impact factor) 4,8 i łącznej ilości cytowań 52, z czego 41 bez autocytowań. Najnowsze cztery z tych prac nie były jeszcze cytowane na dzień przygotowania autoreferatu, zaś największą ilość cytowań, 22, posiada najstarsza z prac, oznaczona symbolem H1, z roku 2013.

Przedstawione prace można by podzielić na dwie grupy. Pierwsza z nich, prace H1-H5, stanowi udokładniona analiza krystalograficzna oraz badania fizykochemiczne, głównie fluorescencji, izomorficznych struktur kwasu orto-fenylenodiboranowego (o-fdba) oraz kompleksów jego fluoropochodnych z 8-hydroksychinoliną (8-HQ). Druga grupa prac, H6-H9, to zbiór interesujących, aczkolwiek luźno ze sobą związanych, z wyjątkiem prac H7 i H8, badań fotokrystalograficznych dość szerokiego wachlarza różnorodnych związków chemicznych w fazie stałej.

Praca H1 dotyczyła wyznaczenia najbardziej prawdopodobnych izomorficznych struktur krystalicznych kwasu o-fdba oraz wpływu rozpuszczalnika (wody) na te struktury. Wkład Kandydatki dotyczył zastosowania nowoczesnych metod krystalografii obliczeniowej w udokładnienie otrzymanych struktur jak i modelowaniu rozmieszczenia kokryształujących cząsteczek wody.

Praca H2 dotyczyła kokryształów fluoropochodnych kwasu o-fdba z 8-HQ. 8-HQ uważana jest za jeden z modelowych związków fotoaktywnych. W tym sensie praca ta wpisuje się w nurt badań fotokrystalograficznych, które używają rozmaitych badań spektroskopowych to dalszego udokładniania struktury otrzymanych kryształów. Głównymi wynikami tej pracy było wyznaczenie struktur krystalograficznych otrzymanych kryształów, a następnie badania ich fluorescencji w celu dalszego udokładnienia najbardziej prawdopodobnych struktur krystalograficznych. Dodatkowo, na bazie otrzymanych fotokompleksów zbudowano diodę elektroluminescencyjną i wyznaczono jej charakterystykę prądowo-napięciową. Wkład kandydatki polegał na obliczeniach i udokładnianiu struktur krystalograficznych, a także syntezie pierwszego, modelowego kompleksu. Przy czym sposób syntezy, właściwą syntezę i oczyszczanie wszystkich sześciu badanych w publikacji kompleksów wydedukował i przeprowadził – wnioskuje na podstawie oświadczeń o wkładzie w publikację – dr inż. K. Durka.

Praca H3 dotyczy formowania się izomorficznych kokryształów kwasu o-fdba z 8-HQ poprzez odparowywanie rozpuszczalnika w środowiskach różnych rozpuszczalników organicznych. Uzyskane rezultaty pozwoliły na uzyskanie najbardziej stabilnego termicznie kokryształu dzięki wyborowi optymalnego rozpuszczalnika (tutaj 1,4-dioksanu), co potwierdzono za pomocą pomiarów DSC. Zmierzono również fluorescencję otrzymanych kompleksów. Niemniej jednak z powodu znikomego wpływu rozpuszczalnika na właściwości emisyjne, pomiary fluorescencji nie pomogły w dalszym udokładnianiu otrzymanych struktur krystalograficznych. Wkład Kandydatki to analiza danych strukturalnych i porównywanie ich z danymi analizy fizykochemicznej.

Praca H4 to kontynuacja wyników pracy H3 w celu otrzymania jeszcze lepszej charakterystyki strukturalnej najbardziej stabilnych termicznie kryształów kokryształów kwasu o-fdba z 8-HQ (uzyskanych przez ewaporację 1,4-dioksanu) dzięki analizie wysokorozdzielczych pomiarów rentgenowskich, a w szczególności modelowaniu rozdzielania się ładunków na atomach w otrzymanych kryształach. Uzyskane rezultaty zostały następnie porównane z widmami fluorescencji, co pozwoliło potwierdzić niektóre ze stawianych hipotez strukturalnych. W ocenie Recenzenta, w tym przypadku jednakże, widma fluorescencji nie przyczyniły się do udokładnień krystalograficznych.



Wkład Kandydatki polegał na udziale w wykonywanych eksperymentach, a także, przede wszystkim, na zastosowaniu adekwatnych metod obliczeniowych i w szczególności udokładnień multipolowych, do wyznaczenia struktury kryształów badanych kompleksów.

Wątek kokryształów kwasu o-fdba ze związkami aktywnymi to również temat pracy H5, gdzie tym razem fluoroforem były pochodne pirydyny. Jak poprzednio Kandydatka przeprowadziła analizę strukturalną otrzymanych kryształów, stosowne udokładnienia, a wspólnie ze swoją obecną współpracowniczką dokonały również pomiarów rentgenowskich i spektroskopowych uzyskanych kokryształów w różnych badanych rozpuszczalnikach. Niemniej jednak pomiary spektroskopowe znów nie znalazły bezpośredniego potwierdzenia i przełożenia na dalsze udokładnianie otrzymanych struktur krystalograficznych, ze względu na wielorakość możliwych interpretacji.

Publikacje H6-H9 stanowią adaptacje opisanych powyżej rodzajów udokładnień strukturalnych i pomiarów fizykochemicznych, głównie fotochemicznych, w celu weryfikacji postawionych hipotez strukturalnych. Badane jednakże były kompleksy metali przejściowych takie jak modyfikowane klastry tytanu (praca H6), klastry srebra(I)-miedzi(I) (prace H7-H8) i wreszcie klastry miedzi (praca H9). Z obiektami badań prac H6-H9 Kandydatka zetknęła się w trakcie swojego stażu naukowego w grupie Prof. P. Coppensa. Badania prowadzone w grupie Prof. Coppensa Kandydatka następnie zaczęła adoptować na gruncie polskim. Badania w/w klastrów zaowocowały dalszym rozwojem warsztatu modelowania strukturalnego Kandydatki oraz możliwościami lepszego udokładniania otrzymanych struktur na bazie suplementarnych pomiarów fotochemicznych.

Podsumowując, zauważalny jest ciągły rozwój naukowy Kandydatki w kierunku coraz dokładniejszych i bardziej zaawansowanych metod krystalografii obliczeniowej, a także w wyborach nowych układów pomiarowych pozwalających jej się rozwijać w dziedzinie fotokrystalografii. Publikacje H1-H5 pozwoliły Jej rozwijać swój warsztat, zaś publikacje H6-H9 stanowią ciekawe kolejne i nowatorskie adaptacje uzyskanej wiedzy w poszerzeniu o nowe techniki interpretacyjne. Ponadto, widać również rozwój Kandydatki w kierunku osiągnięcia niezależności eksperymentalnej i samodzielnego hodowania kryształów jak i ich pomiarów fizykochemicznych. Mimo, że dostępne pomiary fizykochemiczne, a w szczególności fluorescencja, nie przyniosły w większości opublikowanych badań znaczącego zysku do dalszych udokładnień w publikacjach H1-H5, to wybór innych obiektów badawczych (prace H6-H9) pozwolił na przełamanie tej bariery. Jeśli Kandydatka rzeczywiście chce się rozwijać w kierunku doprecyzowania wyznaczanych struktur z pomiarów fizykochemicznych paletę dostępnych badań fizykochemicznych można by w przyszłości poszerzyć o nowe techniki, jak np. S TEM czy AFM.

(2) ocena istotnej aktywności naukowej, dydaktycznej i organizacyjnej.

Całkowity dorobek Kandydatki obejmuje udział w imponującej ilości 49 publikacji naukowych z czasopism o średnim czynniku wpływu 4,7 i łącznej ilości cytowani 696. Indeks Hirsha Kandydatki wynosi 18. Kandydatka brała udział w wielu szkoleniach i jest laureatką wielu programów stypendialnych. Wygłosiła trzy zaproszone wykłady i sześć zaproszonych seminariów. Swoją karierę naukową rozwijała głównie na Uniwersytecie Warszawskim, gdzie obecnie jest zatrudniona na etacie adiunkta, a od roku 2015 jest kierowniczką grantu Sonata przyznanego przez Narodowe Centrum Nauki (NCN). Niemniej jednak odbyła również jeden 1.5 roczny staż podoktorski w jednym z czołowych laboratorium fotokrystalochemii w USA oraz parę innych, krótkotrwałych wyjazdów badawczych. Na uwagę zasługuje również bycie opiekunem naukowym grantu Preludium jednej z doktorantek Wydziału Chemii UW, a także zaangażowanie Kandydatki w polemikę na temat przyszłości polskiej nauki na łamach Pisma Uczelni „UW” jak i materiałach konferencyjnych Narodowego Kongresu Nauki w roku 2017.

Działalność dydaktyczna Kandydatki jest związana głównie z prowadzeniem zajęć z krystalochemii (ćwiczenia i laboratoria) jak i z fizyki (ćwiczenia i laboratoria) dla studentów Chemii UW. Prowadziła również ćwiczenia ze statystyki dla Podyplomowego Studium Metrologii Chemicznej jak i zajęcia ze wspomagania komputerowego dla studentów Chemii. Jest promotorką jednej pracy magisterskiej.

(3) Wnioski końcowe

Podsumowując, przedstawione w ramach osiągnięcia naukowego rezultaty badawcze są ciekawe i dogłębnie analizujące badane zagadnienia. Podstawy teoretyczne oraz stosowane metody badawcze wydają się również odzwierciedlać odpowiednio bieżący stan wiedzy oraz najnowocześniejsze możliwości instrumentalne w dyscyplinach, w których Kandydatka się porusza. Świadczy to zarówno o uzyskaniu przez Kandydatkę znaczącej wiedzy naukowej jak osiągnięciu Jej dojrzałości naukowej. Niemniej jednak brakuje nieco opisu w jaki sposób w/w badania rozwinęły konkretne dziedziny/dyscypliny wiedzy. O ile publikacje H1-H5 stanowią logicznie związane ze sobą wątek badawczy rozwijający wiedzę o związkach między strukturą a fizykochemią, i w szczególności fluorescencją, wybranych kompleksów koordynacyjnych aromatycznych kwasów diboranowych, to publikacje H6-H9 dotyczą innych aspektów fizykochemii całkowicie niezwiązanych z sobą klas związków chemicznych. Dodatkowo oświadczenia o wkładzie każdego z autorów i w konsekwencji o wkładzie dr Jarzębskiej są zebrane nieco chaotycznie. Brakuje przypisania ich do każdej z publikacji z osobna. Utrudnia to w konsekwencji weryfikację wkładu procentowego Kandydatki w każdą z publikacji w przedstawionym osiągnięciu. Niemniej jednak w połączeniu z pozostałymi publikacjami Kandydatki Jej dorobek naukowy jest znaczący zarówno w aspektach jakościowym jak i ilościowym. Dodatkowo, cenne są Jej doceniane nagrodami aktywności dydaktyczne oraz organizatorskie, jak i Jej zaangażowanie na rzecz środowiska naukowego.

Uwzględniając powyższe fakty wnioskuję o przyznanie dr Katarzynie N. Jarzębskiej stopnia doktora habilitowanego z dziedziny chemii i dopuszczenie Jej do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

Dr hab. Robert Szoszkiewicz, prof. ucz.
Kierownik
Laboratorium Fizykochemii Materiałów
Pokoje 2.16, 2.17, CNBCh UW