



UNIwersYTET
WARszAWSKI



Warszawa 20.06.2018

Ocena rozprawy habilitacyjnej i dorobku naukowego dr Marcina Podsiadło

Ocena sporządzona jest w związku ze wszczęciem w dniu 26.01.2018r postępowania habilitacyjnego dr Marcina Podsiadło i informacją z dnia 10.05.2018r o powołaniu mnie przez Centralną Komisję ds. Stopni i Tytułów Naukowych w skład komisji habilitacyjnej jako recenzenta. Opinia sporządzona jest na podstawie materiałów przygotowanych przez Habilitanta. Na dokumentację składają się wniosek z dnia 22.01.2018 o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego w dziedzinie nauk chemicznych w dyscyplinie chemia, kopia dyplomu doktora nauk chemicznych, autoreferat przedstawiający opis dorobku i osiągnięć naukowych w języku polskim oraz angielskim (zawierający również dane osobowe, wykaz posiadanych dyplomów i stopni naukowych, informację o przebiegu zatrudnienia), wykaz opublikowanych prac naukowych wraz z informacją o osiągnięciach dydaktycznych, współpracy naukowej i popularyzacji nauki oraz dane bibliometryczne, kopie 13 opublikowanych prac wchodzących w skład monotematycznego cyklu prac stanowiącego podstawę do wszczęcia procedury habilitacyjnej, oświadczenia autorów publikacji wchodzących w monotematyczny cykl, będący podstawą do wszczęcia procedury habilitacyjnej oraz dane personalne i kontaktowe.

Dane formalne

Kariera naukowa Pana dr Marcina Podsiadło związana jest z Wydziałem Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Tutaj w 2005r wykonał on pracę magisterską pt. „*Wysokociśnieniowe struktury dihalometanów*” oraz w 2009 roku obronił pracę doktorską pt. „*Siły spójności w kryształach halometanów*”. Obie te prace wykonane były pod kierunkiem prof. dr hab. Andrzeja Katrusiaka. Za pracę doktorską otrzymał wyróżnienie od swojej *Alma Mater* (2010). Po ukończeniu studiów doktoranckich został zatrudniony jako

adiunkt w macierzystej Jednostce. W tym okresie odbył on 2.5-letni staż podoktorski w grupie prof. dr hab. Andrzeja Katrusiaka w ramach projektu „*Synthesis and Structure of special Materials in Extreme conditions*” finansowanego w ramach programu TEAM Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej (2010-2012). Oprócz tego odbył kilka krótkoterminowych staży zagranicznych – m.in. w European Synchrotron Radiation Facility, ESRF w Grenoble (Francja) i Deutsches Elektronen-Synchrotron, DESY w Hamburgu (RFN). Uczestniczył również w renomowanej szkole krystalograficznej w Erice na Sycylii (Włochy) „*High-pressure Crystallography. From novel experimental approaches to applications in cutting-edge Technologies*”. Od 2017r pełni funkcję zastępcy kierownika Zespołu Dydaktycznego Chemii Fizycznej i Teoretycznej na Wydziale Chemii UAM.

Rozprawa habilitacyjna dr Marcina Podsiadło jest poświęcona bardzo ważnym zagadnieniom z zakresu chemii strukturalnej związanych z badaniami oddziaływań międzycząsteczkowych oraz przemian fazowych i charakterystyki poszczególnych faz w warunkach wysokiego ciśnienia i/lub niskich temperatur. Badania te dotyczą modelowych związków organicznych, które w normalnych warunkach stanowią ciała gazowe lub ciekłe. W mojej ocenie znaczenie tych badań dla rozwoju nauki jest fundamentalne. Ponieważ procesy technologiczne związane są ze zróżnicowanymi warunkami fizykochemicznymi, wyniki badań habilitanta mogą być również ważne dla potencjalnych zastosowań w przemyśle.

Ocena dorobku naukowego

Dr Marcin Podsiadło opublikował łącznie 30 prac naukowych w czasopismach o zasięgu międzynarodowym, notowanych w bazie *Journal Citation Reports*, z określonym współczynnikiem oddziaływania (IF). W zdecydowanej większości są to prace trójautorskie (22 prace) i dwuautorskie (6 prac). Szacowany udział waha się w granicach 30-80% (średnio, uwzględniając również prace, które stanowią cykl publikacji będących podstawą postępowania habilitacyjnego wynosi on ponad 50%), co świadczy o dominującym wkładzie Habilitanta. Pisma, w których ukazały się prace należą do najlepszych z krystalografii (5 prac w *Crystal Growth&Design*, IF=4.055 oraz 11 prac w *CrystEngComm*, IF=3.474) a także stanowią wiodące periodyki z dziedziny chemii (*Angewandte Chemie International Edition*, IF=11.994, *Journal of the American Chemical Society*, IF=13.858, 2 prace w *Chemical Communications*, IF=6.319). Sumaryczny współczynnik wpływu (*Impact Factor*) wynosi 124.5. Habilitant jest również współautorem 3 innych publikacji, w tym pracy opublikowanej w *Wiadomościach Chemicznych*. Łącznie 17 prac zostało opublikowanych w okresie po obronie pracy doktorskiej,

co uważam za wynik bardzo dobry. Prace Pana dr Marcina Podsiadło były cytowane łącznie 386 razy (314 bez autocytowań), zaś indeks Hirscha wynosi 13. W mojej ocenie jest to również wynik bardzo dobry, który wskazuje na znaczący wpływ prac Habilitanta na rozwój nauki. W materiałach nie znalazłem informacji dotyczącej cytowań poszczególnych prac. Biorąc pod uwagę zasoby *Web of Science*, dr Marcin Podsiadło posiada 8 prac, które są cytowane ponad 20 razy; najlepiej jego cytowana praca ma 44 cytowania. Jest to bardzo dobry rezultat. Dr Marcin Podsiadło przedstawiał wyniki swoich badań w formie 7 wykładów (w tym 2 na zaproszenie), ora 11 prezentacji posterowych na konferencjach o zasięgu międzynarodowym, również 4 plakatów na konferencjach o zasięgu krajowym. 10 prezentacji przedstawionych zostało w okresie po obronie pracy doktorskiej. Habilitant był kierownikiem 1 grantu (*Iuventus Plus*) oraz wykonawcą 6 innych projektów badawczych. W jednym z nich (grant promotorski) pełnił rolę głównego wykonawcy. Za działalność naukową corocznie otrzymywał nagrody i stypendia – m.in. dziewięciokrotnie Nagrodę Zespołową Rektora Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza, również przez okres czterech lat stypendium naukowe dla wybitnego naukowca przyznane przez Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego. Kończąc tę część oceny rozprawy warto zauważyć, że Habilitant był proszony o recenzowanie prac naukowych nadsyłanych do Edytorów ważnych czasopism z jego dziedziny – m.in. *Crystal Growth&Design*, *CrystEngComm* czy *The Journal of Physical Chemistry Letters*. Wskazuje to na uznanie jego kompetencji przez naukowe instytucje zewnętrzne. **W podsumowaniu tej części stwierdzam, iż zarówno całkowity dorobek publikacyjny Habilitanta jak i związana z nim aktywność naukowa jest na bardzo dobrym poziomie.**

Ocena merytoryczna rozprawy habilitacyjnej

Tytuł osiągnięcia naukowego brzmi: „*Słabe oddziaływania międzycząsteczkowe w ścisłanych kryształach*”. Na rozprawę składa się cykl 13 monotematycznych publikacji naukowych opublikowanych w latach 2010-2017. Na podstawie danych z *Web of Science* są one łącznie cytowane 126 razy, co jest wynikiem bardzo dobrym biorąc pod uwagę, że trzy z nich ukazały się w ostatnich latach. Wszystkie zostały opublikowane w znakomitych czasopismach specjalistycznych – *Crystal Growth&Design* (H1, H8, H10, H11, H12), *CrystEngComm* (H3, H4, H5, H6, H7, H9, H13) oraz *Journal of Physical Chemistry C* (H2). Wszystkie przedstawione prace są trójautorskie. W dwóch z nich (H1 i H12) Habilitant jest autorem korespondencyjnym, w siedmiu autorem pierwszym (H1, H2, H3, H4, H9, H12, H13). Zarówno Habilitant jak i pozostali współautorzy prac przedstawili stosowne oświadczenia, które

są spójne. Udział dr Marcina Podsiadło wynosi 30% (H5, H6, H7), 40% (H8, H10, H11), 70% (H9, H13), 80% (H1, H2, H3, H4, H12). Wszystkie przedstawione publikacje to prace oryginalne. We wszystkich pracach (poza H5, H6, H7) procentowy udział, wedle oświadczeń przeważa nad średnim wkładem pozostałych autorów.

Głównym celem jaki postawił sobie Habilitant była krystalizacja oraz strukturalne badania wysokociśnieniowe prostych modelowych układów takich jak halogenowe pochodne metanu (chloro- i bromometan), etan i jego chlorowcopochodne (chloroetan, 1,1,1-trichloroetan, pentachloroetan), propan, butan, 1,2,4-trichlorobenzen, benzen i jego aza analogi (pirydyna, pirydazyna, pirymidyna, pirazyna), aminy alifatyczne: metyloamina, dimetyloamina, trimetyloamina i alkohole alifatyczne: 2-butanol oraz 2,3-butanodiol, zatem związki które w warunkach normalnych stanowią ciała gazowe lub ciecze. Choć część z nich stanowi bardzo dobrze poznane pod względem strukturalnym układy (takim układem jest np. benzen), okazuje się, że badania przeprowadzone przez dr Marcina Podsiadło w dalszym ciągu wprowadzają nowe, nieznane dotąd aspekty związane z ich strukturą. Są to związki o znaczeniu podstawowym, zaś ich właściwości fizykochemiczne stanowią punkt odniesienia dla wielu analiz. Habilitant koncentruje się w pracach na analizie słabych oddziaływań międzycząsteczkowych oraz wynikających z nich zarówno konsekwencji dla budowy cząsteczki jak i architektury kryształu. Dzięki zastosowaniu wysokiego ciśnienia (również dzięki pomiarom niskotemperaturowym) udało mu się odkryć i scharakteryzować nowe odmiany polimorficzne znanych układów, określić obszary ich występowania a także powiązać budowę i oddziaływania międzycząsteczkowe z występującymi przemianami fazowymi. W swej pracy Habilitant dla wybranych układów stworzył lub uaktualnił diagramy fazowe, zależności ciśnienia od temperatury. Są to fascynujące ale jednocześnie bardzo wymagające pod względem eksperymentalnym badania.

Podstawową techniką badawczą, którą się posługiwał w pracy była rentgenowska analiza strukturalna faz monokrystalicznych. Pod względem eksperymentalnym utworzenie odpowiedniego obiektu do badań (monokryształu) w szczególności substancji gazowej nie jest zadaniem trywialnym. Na podkreślenie zasługuje zatem fakt, iż Habilitant sam zbudował a następnie udoskonalił aparaturę do ładowania gazów do komory wysokociśnieniowej. Jest to z pewnością bardzo duże osiągnięcie. Warto również zaznaczyć, iż na ten cel zdobył on grant badawczy w ramach programu *Iuventus Plus*.

Myślę że zbędnym jest omawianie każdej z prac z osobna – mają one zbliżoną strukturę i prowadzą do bardzo wielu ważnych wniosków szczegółowych. Najważniejsze z nich opisane zostały przez Habilitanta w autoreferacie w części „Podsumowanie”. Można do nich zaliczyć:

i) odkrycie nowej wysokociśnieniowej fazy etanu IV (po ciśnieniu 5,90 GPa) oraz wyznaczenie jej stabilności w wysokim ciśnieniu (H1), ii) szczegółowa analiza i wyjaśnienie na poziomie strukturalnym przyczyny najniższej temperatury krzepnięcia wśród związków organicznych dla propanu, jako kompleksowe rozwinięcie badań R. Boesego z lat 90-tych (H2) iii) analiza konkurencyjności słabych oddziaływań międzycząsteczkowych typu halogen...halogen i CH...halogen w strukturach prostych halogenowęglowodorów w warunkach wysokiego ciśnienia oraz wykonanie diagramów fazowych dla chloro- i bromoetanu (H3) iv) wykazanie dla tej grupy układów (chloropochodne etanu), że reguła Carnelley'a może być spełniona dla gęstości związków organicznych (H4), v) wykazanie, że 1,1,1-trichloroetan ze względu na budowę kryształu i duże odległości międzycząsteczkowe może być postrzegany jako „krystaliczny gaz” (H5), vi) wyjaśnienie przyczyn innego wpływu ciśnienia na konkurencyjność oddziaływań Cl..Cl i C-H..Cl w przypadku pentachloroetanu (H6), vii) wykazanie odwrotnej relacji pomiędzy rozszerzalnością termiczną i ściśliwością dla krystalicznego 1,2,4-trichlorobenzenu otrzymanego w warunkach izobarycznych oraz izotermicznych (H7), viii) wyjaśnienie mechanizmu przemiany fazowej dla benzenu w najniższych możliwych ciśnieniach jako wynik konkurencji pomiędzy słabymi oddziaływaniami międzycząsteczkowymi oraz efektem gęstego upakowania (H8), ix) wykazanie roli ciśnienia dla zwiększenia preferencji oddziaływań typu C-H..N w stosunku do C-H.. π dla serii układów aromatycznych – benzenu i jego aza analogów (H9-H11), x) dla serii amin alifatycznych wykazanie systematycznych zależności łączących oddziaływanie międzycząsteczkowe i symetrię własną cząsteczek z takimi makroskopowymi właściwościami fizykochemicznymi jak ciśnienie krystalizacji czy temperatura topnienia (H12), xi) otrzymanie enancjomorficznego rozdzielania mieszanin racemicznych 2-butanolu i 2,3-butanodiolu w warunkach wysokiego ciśnienia oraz wykazanie iż oddziaływanie między cząsteczkami zdominowane są poprzez oddziaływanie CH..O zaś cząsteczki układają się w helisy (H13).

Konkludując: przedstawione prace stanowią badania podstawowe, wykonane z dużą biegłością i na bardzo wysokim poziomie. Bliższe zapoznanie się z nimi sprawiło mi dużą przyjemność intelektualną. Świadczą one o dużej wiedzy, umiejętnościach eksperymentalnych i doświadczeniu Habilitanta. Są one zbieżne z Jego zainteresowaniami naukowymi wykazywanymi na poprzednich etapach kariery naukowej, co świadczy o spójności tematycznej ale również w pewnym stopniu zachowawczym podejściu do prowadzonych badań naukowych. W mojej ocenie jest On wysokiej klasy specjalistą z zakresu strukturalnych badań wysokociśnieniowych. **Nie mam wątpliwości, iż wyniki uzyskane przez dr Marcina**

Podsiadło są ważne, a przedstawione przez niego prace stanowią znaczący wkład w rozwój tej części nauki.

Ocena działalności dydaktycznej i organizacyjnej

Działalność dydaktyczna dr Marcina Podsiadło jest stosunkowo bogata. Habilitant prowadził warsztaty komputerowe oraz szereg zajęć laboratoryjnych z: podstaw chemii, podstaw chemii fizycznej, dyfraktometrii materiałów, krystalochemii, rentgenowskiej analizy strukturalnej, krystalografii, metod dyfrakcyjnych w nauce i technologii, technologii informacyjnej jak również zastosowania informatyki w chemii. Wartym odnotowania jest również pełnienie funkcji tutora studentów studiów I stopnia na kierunku Chemia na Wydziale Chemii UAM oraz 5-krotne prowadzenie laboratoriów na „High-Pressure Single-Crystal Diffraction Workshop”, szkole o międzynarodowej renomie organizowanej cyklicznie na Uniwersytecie im. Adama Mickiewicza. Dodatkowo Habilitant sprawował opiekę nad 4 pracami licencjackimi oraz 9 pracami magisterskimi. Na uwagę zasługuje również fakt pełnienia funkcji promotora pomocniczego w przypadku dwóch przewodów doktorskich mgr Michała Andrzejewskiego oraz mgr Ewy Patyk (oba doktoraty zostały już obronione). Dwukrotnie pełnił rolę recenzenta prac licencjackich. Odnośnie działalności organizacyjnej był członkiem komitetu organizacyjnego „55th European High Pressure Research Group International Meeting” oraz odbywającej się co roku szkoły wysokich ciśnień „High-Pressure Single Diffraction Workshop”. **Podsumowując tę część aktywności uważam, że zarówno działalność dydaktyczna jak i organizacyjna są na bardzo dobrym poziomie.** Pomimo bardzo pozytywnej oceny odczuwam jednak pewien niedosyt odnośnie działalności na rzecz środowiska naukowego poprzez np. włączenie się w działalność Polskiego Towarzystwa Chemicznego, które bardzo pręźnie działa w Oddziale Poznańskim, czy też Polskiego Towarzystwa Krystalograficznego.

Konkluzja

Prace będące podstawą przewodu habilitacyjnego stanowią cykl monotematyczny. Wnoszą one istotny wkład w wysokociśnieniową chemię strukturalną układów organicznych. W badaniach Habilitant posługuje się nowoczesnymi narzędziami badawczymi. Stwierdzam, iż dorobek naukowy, organizacyjny i dydaktyczny oraz

rozprawa habilitacyjna spełnia wymagania ustawy o tytule naukowym i stopniach naukowych oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki z dnia 14 marca 2003r (Dz. U. z 2016r poz. 882 ze zm. w Dz. U. z 2016r. poz. 1311) i wnioskuję do Rady Wydziału Chemii im. Adama Mickiewicza w Poznaniu o nadanie dr Marcinowi Podsiadło stopnia naukowego doktora habilitowanego nauk chemicznych.



Michał K. Cyrański