

**Recenzja rozprawy habilitacyjnej (osiągnięcia naukowego) „Organiczne związki makrocykliczne jako prekursorzy nowych materiałów porowatych” oraz całości dorobku zawodowego dr. Agnieszki Janiak**

W związku z rozpoczętą na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu procedurą habilitacyjną dr Agnieszki Janiak, adiunkt na Wydziale Chemii UAM i z powołaniem mnie w skład komisji habilitacyjnej w tym postępowaniu (powołanie komisji nastąpiło 8 listopada 2018), otrzymałem do recenzji zestaw dokumentów obejmujący m.in. autoreferat, kopie publikacji stanowiących oceniane osiągnięcie naukowe, a także wykaz opublikowanych prac naukowych (wraz z pobieżną analizą scjentometryczną) oraz informacje o osiągnięciach dydaktycznych, współpracy naukowej i popularyzacji nauki.

Pani dr Agnieszka Janiak uzyskała tytuł zawodowy magistra chemii w 2002 roku na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza po obronie pracy zatytułowanej „Rentgenograficzne badania struktury kryształów zawierających mostkowane układy difenowe”, a wykonanej pod opieką prof. Urszuli Rychlewskiej. Jej dalsza kariera, poza bardzo jak się wydaje owocnym, dwuletnim podoktorskim stażem naukowym na Uniwersytecie Stellenbosch, jest ściśle związana z tym samym Wydziałem Chemii UAM. Tutaj w roku 2008 roku obroniła wykonaną nadal pod kierunkiem prof. Rychlewskiej rozprawę doktorską zatytułowaną „Badania słabych oddziaływań specyficznych i zjawiska inkluzji w kryształach organicznych”, tutaj od października 2008 jest zatrudniona na stanowisku adiunkta, tutaj też odbywa się postępowanie w sprawie jej wniosku habilitacyjnego.

### **Ocena aktywności naukowej**

Dorobek naukowy Habilitantki obejmuje (według Web of Science, na dzień 11 grudnia 2018) 38 publikacji (w tym 37 w czasopismach z listy JCR), z czego 13 zostało opublikowanych przed doktoratem. Sumaryczny czynnik wpływu tych publikacji wynosi 141,48, według WoS były one cytowane 340 razy (bez autocytowań 290), a indeks Hirscha p. dr Janiak wynosi 11.

Na podkreślenie zasługuje dość wysoki średni IF na jedną publikację (prawie 4), i rzeczywiście lista czasopism, w których publikacje się ukazały jest godna szacunku: Chem. Commun, (6.3), Arabian J.Chem. (4.5), Cryst. Growth Des. (4.1), Org.Biomol.Chem. (3.6) itd. Zdarzają się też Acta Cryst. C, ale to akurat czasopismo (mimo, że w czasie, kiedy p. dr Janiak

publikowała tam swoje prace miało dosyć niskiemu IF) bywa przez krystalografów traktowane jako godne uwagi wskutek wysokich wymagań warsztatowych, w pewnym sensie potwierdzenie znajomości warsztatu tego cechu.

Dorobek naukowy Habilitantki obejmuje również 2 wykłady na konferencjach (jeden – ale za to na zaproszenie – na Konwersatorium PTK), 6 wystąpień na seminariach, oraz 32 komunikaty posterowe na konferencjach naukowych (w tym 7 prezentowanych przez dr Janiak). Kilkakrotnie recenzowała prace dla czasopism o ogólnoświatowym zasięgu (Nature Materials, Crystal Growth Current Org.Chem., Acta Cryst. B i C).

W latach 2006-2008 była wykonawcą grantu promotorskiego dla doktorantów, przyznawanego przez MNiSW (w tym czasie kierownikiem tego rodzaju grantów był promotor), brała udział w realizacji grantu KBN i grantu NCN Maestro prof. J. Gawrońskiego. Grant National Research Foundation of South Africa pozwolił p. dr Janiak na odbycie dwuletniego stażu podoktorskiego na University of Stellenbosch.

Za osiągnięcia naukowe Habilitantka była laureatką nagrody zespołowej Rektora Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza, a także prestiżową w środowisku nagrodą DIAMENTY 2016 za wyróżnioną polską pracę krystalograficzną.

*Aktywność naukowa dr Agnieszki Janiak, w tym również dorobek po doktoracie, spełnia z dużym nadmiarem wymagania stawiane habilitantom. Cały dorobek dr Janiak – zarówno będący podstawą wniosku habilitacyjnego, jak i pozostałe dokonania naukowe - oceniam jako bardzo dobry.*

## Osiągnięcie naukowe

Przedmiotem habilitacji (osiągnięciem naukowym) jest jednotematyczny cykl dziewięciu artykułów, których współautorem jest p. dr Janiak. Publikacje te ukazały się w latach 2014 – 2018 (w tym aż osiem w ostatnich dwóch latach!), w czasopismach o sumarycznym czynniku wpływu 33,944: dwa w ChemComm, trzy w CrystEngComm, po jednej w Cryst.Growth Des., Org.Biomol.Chem., Tetrahedron: Asymmetry i Supramol.Chem. i jak dotąd były cytowane 49 razy według Web of Science (10 grudnia; bez autocytowań 29 razy). Biorąc pod uwagę wspomnianą wcześniej względną „świeżość” większości publikacji cyklu te ostatnie liczby są całkiem zadowalające. W czterech z tych publikacji dr Janiak jest pierwszym autorem, a w siedmiu jednym z autorów korespondencyjnych. Trzy z tych artykułów (**H4**, **H6** i **H8**) były napisane na zaproszenie do specjalnych numerów czasopism.

Z dołączonych oświadczeń bardzo wyraźnie wylania się wiodąca rola Autorki w opracowaniu koncepcji i w samych badaniach opisywanych jako osiągnięcie naukowe.

Autoreferat napisany jest ciekawie, widać, że Autorka doskonale wie, o czym pisze. Nie udało się co prawda uniknąć kilku niezręczności (np. „najbardziej optymalny”) lub wyrażen slangowych (np. „pomiar wiązek dyfrakcyjnych”), ale nie zakłócają one dobrego wrażenia na temat recenzowanego tekstu.

Motywacja do podjęcia badań – wkład w zrozumienie zjawiska inkluzji w celu umożliwienia projektowania nowych materiałów o pożądanym właściwościach – jest jasno

sformułowane i uzasadnione przez Autorkę. W szczególności jej zainteresowania ogniskowały (ogniskują?) się wokół molekularnych materiałów porowatych, zbudowanych z jednostek połączonych w strukturze kryształu molekularnego wyłącznie za pomocą słabych, mniej lub bardziej specyficznych, oddziaływań międzycząsteczkowych, a więc bez silnych wiązań jonowych czy koordynacyjnych utrzymujących strukturę kryształu. W pewnym sensie pani dr Janiak zainteresowały więc odstępstwa od dość lubianej przez naturę zasady gęstego upakowania i niechęci do wolnych przestrzeni. Obiektem zainteresowań Habilitantki stały się związki makrocykliczne, syntezowane w Pracowni Stereochemii Organicznej Wydział Chemii UAM (chiralne – stosownie do głównego nurtu badań tej pracowni - pochodne diaminocykloheksanu: trianilminy, trianliminy, kaliksoleny) albo w laboratorium prof. Barboura w Stellenbosch (achiralne pochodne p-metoksy-tert-butylobenzenu, tiakaliks[4]areny), których struktury były modyfikowane w celu zwiększenia szans na występowanie inkluzji i porowatości.

Bardzo pouczające i przyjemne jest obserwowanie w jaki sposób p. dr Janiak powiększała swój arsenał, który miał jej pomóc w atakowaniu wybranych przez siebie problemów. Znakomita znajomość metod i technik rentgenowskiej analizy strukturalnej była podstawą, a trzeba przyznać, że nie trafiają się Jej w zasadzie proste struktury. Już krystalizacja tych związków jest zadaniem samym w sobie, a potem pojawiały się nieporządek, zmiany strukturalne, zbliżnienia, cała ta różnorodność technicznych problemów, na jakie można natrafić podczas rozwiązywania/udokładniania/analizowania struktur kryształów, które – mówiąc nieco kolokwialnie – dla p. dr Janiak są chlebem powszednim. Do badań strukturalnych dołączane następnie były badania sorpcyjne, dyfraktometria proszkowa, analiza grawimetryczna, skaningowa mikroskopia elektronowa, różnicowa kalorymetria skaningowa, mikroskopia wysokotemperaturowa i tak dalej. Jeśli dodamy do tego znajomość metod obliczeniowych chemii kwantowej, uzyskaną podczas rocznego stażu w Zakładzie Chemii Kwantowej Wydziału Chemii UAM, uzyskamy prawdziwy obraz doskonale i wszechstronnie wyszkolonego fachowca, przygotowanego do trudnych, ponadstandardowych badań strukturalnych.

Cykl zaczynają dwie prace w pewnym sensie pojedyncze, opisujące właściwości inkluzyjne i sorpcyjne mostkowanej trianilminy (**H1**) oraz trianliminy (**H2**). W pierwszej z nich pokazano, że można „namówić” cząsteczki o specyficznym kształcie do inkluzji serii liniowych alkoholi, od etanolu do *n*-oktanolu. Co więcej, w wyniku wnikliwych badań pokazano, że poprzez wybór alkoholu o odpowiedniej długości łańcucha można powiększyć dostępną w strukturze kryształu przestrzeń od izolowanych luk do kanałów o zmiennej średnicy. Z kolei użycie rozpuszczalnika o rozgałęzionym łańcuchu węglowym pozwoliło na uzyskanie dwóch postaci *apobost*.

Drużga praca jest tym bardziej warta odnotowania, że pokazuje krystalograficzny „zab” i ciekawość Habilitantki. Podczas badania form porowatych trianliminy odkryła, że przy okazji otrzymała nieznaną wcześniej postać formy *apobost*, a właściwie dwie nowe formy, które przechodzą w siebie nawzajem w temperaturze ok. 220K. To najwyraźniej zaciekało p. dr Janiak, bo bardzo szczegółowo i pomysłowo zbadała to przejście fazowe, określiła temperaturę przemiany, opisała histerezę właściwości termicznych i zaproponowała (raczej „objawowy”, co prawda) model przejścia fazowego.

Sześć następnych prac cyklu, **H3** – **H8**, poświęcone są badaniu motywów supramolekularnych w kryształach kaliksolenów. Kaliksoleny to stosunkowo nowa grupa związków, o ciekawych właściwościach katalitycznych i fluorescencyjnych, syntezowanych i badanych w grupie prof. Marcina Kwita; trzeba dodać, że badania były częściowo wykonywane we współpracy z zespołem prof. Lena Barboura w Stellenbosch. W wyniku tych badań

stwierdzono, że zmieniając podstawnik w pozycji C5 można sterować sposobem ułożenia cząsteczek w ciele stałym, np. tworząc homochiralny dimer typu „ogon-do-ogona”, czy też – w obecności donorów i akceptorów wiązań wodorowych – klepsydr molekularnych typu „głowa-do-głowy”. Na podkreślenie zasługuje tutaj bardzo staranne badanie oddziaływań w strukturach kryształów, co pozwoliło Autorce na rozróżnienie na przykład między wpływem oddziaływań  $\pi \cdots \pi$ , C-H $\cdots$  $\pi$  czy C-H $\cdots$ N. Różne rodzaje upakowania powodują z kolei możliwość tworzenia luk strukturalnych, które mogą być wypełnione cząsteczkami rozpuszczalnika. Badania kaliksalenów stanowią największy objętościowo, a i też chyba najważniejszy, składnik osiągnięcia naukowego. Muszę przyznać, że zrobiły one na mnie bardzo dobre wrażenie, zarówno pod względem jakości naukowej jak i staranności przedstawienia wyników. Bardzo dobrze dobrane i opisane rysunki ułatwiają zrozumienie przekazu Autorki – to samo widoczne jest w publikacjach. Warto z pewnością ten aspekt podkreślić, często (nad)używane stwierdzenie o wartości merytorycznej jednego obrazka znajduje tu bardzo precyzyjne potwierdzenie.

Dla grupy kaliksalenów z małym podstawnikiem w pozycji C5 Autorka, zachęcona obliczonymi w wyniku badań strukturalnych objętościami luk, wykonała (praca **H8**) badania sorpcji gazów w sproszkowanych próbkach. Dzięki tym badaniom pokazała, że zdolności sorpcyjne związków z podstawnikiem Cl lub Br są znacznie lepsze niż dla podstawionych H lub F. Przy okazji wykazała, że dwie formy apohost tych struktur mogą zmieniać się pod wpływem ciśnienia gazu. Te wyniki potwierdziły się w badaniach zdolności tworzenia solwatów przez pochodne z różnymi podstawnikami. O ile formy z F lub H dawały zawsze formę apohost, dwa pozostałe chętnie tworzyły solwaty.

Wreszcie ostatnia praca cyklu **H9** opisuje szalenie ciekawy – i warty rozwijania – problem zjawiska dyfuzji cząsteczek rozpuszczalnika w kryształach, które z pozoru wydają się nieporowate. W skrócie chodzi o to, czy do transportu cząsteczek w kryształach niezbędne są kanały, czy wystarczą luki strukturalne (albo wręcz molekularne). Gdyby ta druga możliwość okazała się prawdziwa, znaczyłoby to, że kryształy są znacznie bardziej elastyczne, niż do tej pory sądzono, albo że pojęcie promieni van der Waalsa wymaga gruntownego przemyślenia. Badania opisane w pracy **H9** wpisują się w ten właśnie nurt rozważań i dotyczą inkluzji i transportu cząsteczek wody/chlorowodoru/jodu w kryształach tiakaliks[4]arenu. W wyniku badań stwierdzono m. in., że dwa rodzaje cząsteczek (polarne i niepolarnie, np. woda i jod) mogą dyfundować niezależnie od siebie, różnymi lukami, przez sieć krystaliczną.

Podsumowując, cykl prac przedstawiony jako osiągnięcie habilitacyjny jest spójny, z wyraźnie zaznaczoną rolą Habilitantki. Prace są kompletne, a jednocześnie otwierają perspektywy przyszłych badań.

*Cykl dziewięciu prac, przedstawiony przez p. dr Agnieszkę Janiak jako osiągnięcie naukowe w procedurze habilitacyjnej spełnia, moim zdaniem, wszystkie wymogi – zarówno formalne, jak i zwyczajowe – stawiane w tego rodzaju postępowaniach. Autorka pokazuje umiejętność współpracy z innymi grupami badawczymi przy jednoczesnym zachowaniu wiodącej roli w określaniu tematyki i zakresu badań. Cykl prac jest bardzo interesujący, znajduje oddźwięk w literaturze naukowej i wnosi istotny wkład w zrozumienie zasad wpływających na możliwość powstawania struktur porowatych, a także na zjawiska transportu w kryształach.*

## Charakterystyka dorobku dydaktycznego i organizacyjnego

Pani dr Agnieszka Janiak jak do tej pory prowadziła ze studentami głównie zajęcia laboratoryjne i ćwiczenia, między innymi z krystalochemii, krystalografii, krystalografii rentgenowskiej, analizy rentgenograficznej, metod badania ciała stałego. opiekowała się dwiema pracami licencjackimi i czworgiem magistrantów p. prof. Rychlewskiej.

W latach 2008/2011 była opiekunem roku kierunku „Chemia i przyroda”.

W kadencji 2016 – 2020 jest członkiem Wydziałowej Komisji Wyborczej, angażuje się też w sprawdzanie/sprawdzanie nowego sprzętu dla Wydziału.

*Zaangażowanie w dydaktykę oraz działalność organizacyjną p. dr Agnieszki Janiak oceniam jako wystarczające i raczej typowe dla adiunkta ubiegającego się o stopień doktora habilitowanego.*

### Konkluzja

Wysoko oceniam aktywność naukową dr Agnieszki Janiak oraz inne aspekty jej działalności. Jestem pod wrażeniem dorobku naukowego, w szczególności cyklu 9 prac, z bezdyskusyjną rolą Habilitantki, który stanowi zgłoszone osiągnięcie naukowe. Moim zdaniem Habilitantka faktycznie już teraz sama określa sobie cele badawcze i znajduje (a na dodatek szybko sobie przyswaja) metody do ich osiągnięcia, a więc w gruncie rzeczy jest już samodzielnym pracownikiem naukowym, a habilitacja jest tylko potwierdzeniem tego faktu.

Stwierdzam, że przedstawione mi do oceny materiały dotyczące dr Agnieszki Janiak stanowią wystarczającą podstawę do ubiegania się o stopień doktora habilitowanego. Moim zdaniem, wypełniają one zarówno wymogi Ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz.U. nr 65, poz. 595 z późn. zm.), jak i Rozporządzenia Ministra nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 1 września 2011 w sprawie kryteriów oceny osiągnięć osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego (Dz.U. nr 196, poz.1165).

Maciej Kuch 5