

Opinia
o osiągnięciach naukowo-badawczych, dydaktycznych, współpracy naukowej
i popularyzacji nauki Pani dr Anny Szwajca w związku z postępowaniem
w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego

Ocenę dorobku naukowego i rozprawy habilitacyjnej Pani dr Anny Szwajca przygotowałam na prośbę Dziekana Wydziału Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu w związku z postanowieniem Centralnej Komisji ds. Stopni i Tytułów z dnia 10.03.2016. Opinię wykonałam w oparciu o zestaw dokumentów obejmujących: wniosek Kandydatki z dnia 23.12.2015. o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego w dziedzinie nauk chemicznych (w dyscyplinie chemia), autoreferat w języku polskim i angielskim, wykaz opublikowanych prac naukowych lub twórczych prac zawodowych, informacji o osiągnięciach dydaktycznych, współpracy naukowej i popularyzacji nauki, oświadczenia współautorów publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe, o którym mowa w art. 16 ust. 2 ustawy, kopie publikacji włączonych do habilitacji, odpis dyplomu doktora nauk chemicznych w zakresie chemia i danych adresowych.

Sylwetka Kandydatki

Pani Anna Szwajca w 1999 roku ukończyła studia na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu uzyskując tytuł zawodowy magistra na podstawie pracy magisterskiej pt. „*Kinetyka reakcji deprotonowania IV-rzędowych soli pochodnych 4-metylo i 4-cyjanopirydyniowych*” wykonywanej w Zakładzie Fizycznej Chemii Organicznej pod kierunkiem prof. dr hab. Zofii Dega-Szafran. Jej badania przedstawione w pracy zostały wyróżnione w konkursie na najlepszą pracę magisterską wykonywaną w roku akademickim 1998/99. Po rocznym zatrudnieniu na stanowisku asystenta w Zakładzie Fizycznej Chemii Organicznej podjęła 4-letnie studia doktoranckie i w 2004 roku obroniła pracę doktorską z zakresu nauk chemicznych promowaną przez prof. dr hab. Mirosława Szafrana na temat „*Ylidy pirydyniowe – właściwości fizykochemiczne, struktura i reaktywność*”. Od 2005 roku dr Anna Szwajca jest zatrudniona na etacie adiunkta w Zakładzie Syntezy i Struktury Związków Organicznych na Wydziale Chemii UAM, z którym do chwili obecnej związana jest jej działalność naukowo-badawcza i dydaktyczna.

W karierze naukowej dr Szwajca istotną rolę odegrały również dwa staże naukowe: 3-miesięczny w Instytucie Ciężkiej Syntezy Organicznej „Blachownia” w Kędzierzynie Koźlu w ramach stypendium krajowego Fundacji na rzecz Nauki Polskiej w 2007 roku oraz 19-miesięczny staż podoktorski w grupie profesora Marca Tornow w Instytucie Technologii Półprzewodników (Institute of Semiconductor Technology) na Uniwersytecie Technicznym w Brunshwiku (Niemcy) (2008–2010).



Ocena dorobku naukowego Kandydatki

W chwili obecnej dr Anna Sz wajca jest współautorką 19 artykułów naukowych opublikowanych w czasopismach znajdujących się w bazie JCR, w tym 16 po uzyskaniu stopnia doktora. Ponadto Kandydatka jest współautorką 6 prac w monografiach w języku polskim i angielskim. Sumaryczny współczynnik oddziaływania IF wszystkich prac dr Anny Sz wajca według listy JCR zgodnie z rokiem publikowania (od 2004 do 2016 roku) wynosi ok. 47,193, natomiast średni IF rzędu 2,484 na jedną pracę w dziedzinach z zakresu badań Habilitantki można uznać za dobry.

Przy ocenie działalności naukowej należy wziąć pod uwagę nie tylko liczbę publikacji, ale również ich wpływ na rozwój nauki. Według bazy Web of Science całkowita liczba cytowań prac Autorki z dnia 18.04.2016. wynosi 96 a bez autocytowań 80, natomiast index Hirscha równa się 7. Z przytoczonych danych bibliometrycznych wynika, że prace Habilitantki są stosunkowo słabo zauważane w literaturze międzynarodowej. Biorąc pod uwagę lata pracy oryginalny dorobek dr Anny Sz wajca nie jest może imponujący, ale uznaję go za zadowalający dla potrzeb postępowania habilitacyjnego.

W początkowym okresie działalności naukowej, w czasie studiów doktoranckich, dr Anna Sz wajca prowadziła badania dotyczące właściwości czwartorzędowych soli pirydynowych i ich ylidów (prace P1–P3). Istotną część rozprawy doktorskiej Kandydatka realizowała w ramach grantu promotorskiego pt. „*Nowe czwartorzędowe sole pirydynowe i ich ylidy*” (2002–2004), którego celem było wyjaśnienie małej trwałości ylidów pirydynowych. Zsyntezowane sole czwartorzędowe i ich ylidy oraz niektóre produkty rozpadu dr Sz wajca charakteryzowała za pomocą różnych metod fizykochemicznych (metody spektroskopowe – UV-Vis, FT-IR, ^1H i ^{13}C NMR oraz 2D NMR z wykorzystaniem heterojądrowej korelacji z detekcją przejść wielokwantowych HMQC i dalekiego zasięgu HMBC oraz homojądrowej techniki wielowymiarowej NOESY), wspomaganymi obliczeniami teoretycznymi.

Bezpośrednio po uzyskaniu stopnia doktora Kandydatka kontynuowała i rozwijała tę tematykę, o czym świadczą kolejne artykuły (prace P4–P7), przy czym jej badania skupiały się między innymi na trwałości ylidów, generowanych w roztworach silikonowych polipodandów, analizy struktury soli pirydynowych w kryształach (analiza krystalograficzna) i w fazie gazowej (techniki modelowania), spektroskopowej oceny ilościowej równowagi keto-enolowej w roztworze wodnym. W dorobku Habilitantki znajdują się również kompleksowe badania (synteza, badania krystaliczne i spektroskopowe) związków cyklicznych powstałych w wyniku czwartorzędowania pirydyn podstawionych w pozycji α pierścienia pirydyny.

Synteza i badania fizykochemiczne surfaktantów (P8) to kolejne badania dr A. Sz wajca prowadzone w Pracowni Chemii Mikrobiocydów kierowanej przez dr hab. Bogumiła Bryckiego, prof. UAM i kontynuowane w ramach krajowego stypendium wyjazdowego Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej w Zakładzie Środków Powierzchniowo Czynnych Instytutu Ciężkiej Syntezy Organicznej w Kędzierzynie-Koźlu. Habilitantka uczestniczyła w w/w jednostce w pracach nad opracowaniem efektywnej metodologii syntetycznej wyjściowych substratów do syntezy dimerycznych surfaktantów alkiloamoniowych (tzw. struktur

geminii), których identyfikację chromatograficzną wykonywała z wykorzystaniem sprzężonego układu chromatografii gazowej i spektroskopii masowej (GC/MS oraz ES-MS).

Zainteresowania tematyką zjawisk międzyfazowych przy realizacji projektu dotyczącego uwalniania triklosanu z mikrokapsuł polilaktydowych na powierzchni celulozy (P9) przy współpracy z Instytutem Włókiennictwa w Łodzi zaowocowały zmianą tematyki badawczej w kierunku chemii materiałowej i różnych aspektów związanych z fizykochemią powierzchni. Umiejętności i wiedza zdobyte w Zakładzie Syntezy i Struktury Związków Organicznych kierowanym przez prof. dr hab. Henryka Koroniaka i innych zespołach naukowych Wydziału Chemii UAM, poszerzone o nowe metodologie badawcze, Kandydatka wykorzystwała w czasie stażu w Instytucie Technologii Półprzewodników w Brunszwiku oraz do przygotowania rozprawy habilitacyjnej. Efektem jej pracy współpracy są również artykuły P10 i P11.

Na podstawie przedstawionej dokumentacji można również ocenić aktywność Habilitantki związaną z innymi formami upowszechniania wyników Jej badań. Dr A. Szwajca wygłosiła na zaproszenie 2 wykłady w krajowych i zagranicznych ośrodkach naukowych, przedstawiła 6 prezentacji ustnych oraz 23 posterów (15 po doktoracie) na międzynarodowych i krajowych konferencjach naukowych.

W 2014 roku Habilitantka była członkiem Zespołu, który otrzymał zespołową nagrodę II stopnia Rektora UAM w Poznaniu za osiągnięcia w pracy naukowej. W 2015 roku została 3 krotnie zaproszona do recenzji publikacji zgłoszonych do *Pol. J. Chem. Technol., Surf. Interface Anal.* i *Sci. Res. Essays*.

Na uwagę zasługują starania Kandydatki w pozyskiwaniu środków na finansowanie swoich badań. W trakcie wykonywania pracy doktorskiej realizowała grant promotorski z KBN No 4T09A10025. W latach 2011–2014 była również kierownikiem 3-letniego grantu z NCN: nr NN204444740 oraz wykonawcą w projekcie nr NN204277240. Uczestniczyła również jako wykonawca w projekcie realizowanym podczas stażu podoktorskiego w Uniwersytecie Technicznym w Brunszwiku (BMBF grant 03X5513) oraz projekcie z Programu Juventus Plus Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa wyższego.

Pani dr A. Szwajca w trakcie pracy na stanowisku adiunkta podnosiła swoje kwalifikacje uczestnicząc w krajowych i zagranicznych szkoleniach i warsztatach, np. Electron Spectroscopic Surface Science Methods: XPS and STM/AFM.

Ocena prac stanowiących podstawę postępowania habilitacyjnego

Pani dr Anna Szwajca jako osiągnięcie naukowe, będące podstawą postępowania habilitacyjnego, przedkłada do oceny cykl 8 artykułów naukowych, które zostały opublikowane w latach 2013–2016. Wybrany dorobek publikacyjny Kandydatka zatytułowała „*Procesy organizacji i wiązania cząsteczek związków organicznych w trwałe układy molekularne na podłożu stałym*”. Stanowią go prace opublikowane w bardzo dobrze i dobrze notowanych czasopismach naukowych z listy filadelfijskiej: *ACS Nano* (IF=12,033 (2013)), *Macromolecules* (IF=5,8 (2014)), *Applied Surface Science* (IF=2,538 (2013)), *Journal of Fluorine Chemistry* (IF=1,948 (2014/2015)), *Thin Solid Films* (IF=1,7759 (2014)), *Surface Science* (IF=1,925 (2015)) oraz *Phosphorus, Sulfur, and Silicon and Related Elements* (IF=0,561 (2015)). Sumaryczny wskaźnik oddziaływania wszystkich prac, zgodnie

z rokiem ich opublikowania, wynosi 28,512, co w przeliczeniu na jedną publikację daje średni IF=3,564. Jednak „efektywny IF”, uwzględniający deklarowane procentowe udziały Habilitantki jest już znacznie niższy (ok. 10,643), ale dostateczny na tym etapie kariery naukowej, tym bardziej, że jest to efekt tylko 4 lat pracy. Zgodnie z bazą Web of Science z dn. 18.04.2016. wspomniane artykuły były cytowane 18 razy (bez autocytowań), co dowodzi, że zostały już zauważone przez innych badaczy.

Wszystkie publikacje rozprawy habilitacyjnej mają charakter wieloautorski (H1–16; H2, H4–5; H3, H8–2; H5, H7–3, H6–4). Wszyscy współautorzy przedłożyli oświadczenia o udziałach i wkładzie intelektualnym w przygotowanie publikacji, z których wynika, że w przypadku sześciu publikacji (H2, H3, H5–H8) włączonych do postępowania habilitacyjnego dr A. Szwejca wniosła dominujący wkład merytoryczny pełniąc również rolę autora korespondującego. Z załączonych dokumentów wynika, że Habilitantka jest autorką lub współautorką koncepcji naukowej zrealizowanych prac badawczych, wykonawcą eksperymentów i uczestniczyła w redakcji publikacji. W pracach H3 i H8 udział Habilitantki wynosi 90%, w H5 i H7 85%, natomiast w pracy H6 70% a H2 60%. W przypadku dwóch prac o najwyższych wskaźnikach oddziaływania IF=12,033 (H1) i IF=5,8 (H4) dr A. Szwejca wykonała część badań eksperymentalnych i oszacowała swój udział odpowiednio na 10 i 20%. Z formalnego punktu widzenia średni udział Kandydatki przeliczony na jedną publikację wynosi 63,75% co świadczy, że jest on dominujący.

Temat osiągnięcia naukowego dr A. Szwejca związany jest nanotechnologią, najszybciej rozwijającą interdyscyplinarną dziedziną nauki i intensywnymi badaniami nanomateriałów prowadzonymi od ponad 50 lat. Dzięki ich unikatowym właściwościom fizycznym, chemicznym i biologicznym znalazły one zastosowanie między innymi w elektronice, optoelektronice czy biomedycynie. Miniaturyzacja wymusza zmniejszenie rozmiarów urządzeń przy jednoczesnym zwiększeniu ich wydajności i wydłużeniu czasu pracy. Jest to możliwe dzięki modyfikacji np. powierzchni półprzewodników związkami organicznymi, a o nowych właściwościach takich układów decydują oddziaływania związku organicznego z powierzchnią w taki sposób, by możliwa była łatwa wymiana ładunku elektrycznego pomiędzy fazą nieorganiczną i organiczną.

Badania dr Anny Szwejca są podsumowaniem jej zainteresowań związanych z modyfikacją powierzchni wybranych ciał stałych (głównie półprzewodników i modyfikowanego szkła) warstewkami związków organicznych o różnej budowie i właściwościach w celu otrzymania materiałów o nowych właściwościach chemicznych i elektrycznych. Wstępne badania Habilitantki wiązały się z odpowiednim przygotowaniem podłoża, a następnie opracowaniem optymalnej i powtarzalnej metody osadzania związków organicznych na powierzchniach krystalicznych nieorganicznych półprzewodników: Si(001) i InAs(001) z wykorzystaniem reakcji fotochemicznych i termicznych oraz na powierzchniach polimerowych uzyskanych w wyniku wcześniejszej modyfikacji: krzemu funkcjonalizowanego cząsteczkami silanorganicznymi oraz szkła z warstewkami alkilosilanów. Do zobrazowania efektów modyfikacji powierzchni ciał stałych i charakterystyki fizykochemicznej uzyskanych warstewek, tj. struktury, topografii, stopnia pokrycia, jakościowego i ilościowego ich składu dr Szwejca wykorzystwała nowoczesne techniki i aparaturę stosowaną do badania powierzchni:

mikroskopię sił atomowych (AFM), Kelwinowską mikroskopię sił atomowych (KPFM), skaningową mikroskopię tunelową (STM), spektroskopię fotoelektronową i promieniowania rentgenowskiego (UPS i XPS). Ponadto właściwości powierzchni analizowała stosując spektroskopię w podczerwieni (ATR-FTIR), elipsometrię i mikroskopię fluorescencyjną. W celu określenia charakteru hydrofilowo-hydrofobowego badanych warstwek zostały zmierzone wstępujące kąty zwilżania wody. Dla niektórych układów dr Szwajca przeprowadziła modelowanie molekularne na podstawie obliczeń kwantowo-chemicznych stosując metody semiempiryczne (PM5, PM6 i AM1d) oraz teorię funkcjonału gęstości (DFT).

Habilitantka postawiła sobie za zadanie otrzymanie i scharakteryzowanie:

- monowarstw alifatycznych tioli o różnej długości łańcucha i rodzaju na powierzchni półprzewodnika InAs(100) (praca H6),
- warstwek fluorowanych pochodnych pentafluranoy na powierzchni Si(001) (praca H2),
- skoniungowanych adduktów 2'-deoksyadenozyny na powierzchni Si(001) modyfikowanej aminosilanami (praca H5),
- warstwek kopolimerów fluorowanego α -metylostyrenu ze styrenem na powierzchni szkła funkcjonalizowanego alkilosilanami (praca H4),
- alifatycznych alkoholi polifluorowanych o różnej długości łańcucha na hydrofobowej powierzchni Si(001) (praca H7),
- polioligofenylowinyli (OPV) na powierzchni półprzewodnika InAs (1).

Na podstawie kompleksowej analizy uzyskanych wyników Autorka wnioskuje, że warstewki hybrydowe InAs/SAM są homogeniczne i jednorodne (H6), a cząsteczki tioli w monowarstwie są nachylone do powierzchni pod kątem 30°.

Kandydatka wykazała, że fluorowane pochodne pentafluranoy łączą się z powierzchnią podłoża grupami -OH znajdującymi się przy atomach węgla C3 lub C5 (H2). Ponadto Autorka stwierdziła, że wartości makroskopowych kątów zwilżania wody na powierzchni krzemowych funkcjonalizowanych wybranymi pochodnymi pentafluranozowymi (a nie dla powierzchni) zależą od ilości atomów fluoru znajdujących się w cząsteczce. Moim zdaniem nie występuje bezpośrednia zależność pomiędzy kątem zwilżania a rodzajem i gęstością upakowania danych atomów na powierzchni, ponieważ zmiana kątów zwilżania może wynikać np. z heterogeniczności, szorstkości powierzchni, warunków pomiaru kąta zwilżania oraz wielkości kropli. Na „gładkiej” nieobrabananej powierzchni politetrafluoroetyleny (PTFE), o średniej wysokości nierówności ok. 150 nm wstępujący kąt zwilżania wody wynosi 120°, natomiast po obróbce papierem ściernym o granulacji #240 następuje wzrost kątów zwilżania wody o ok. 20°. W tym przypadku wzrost hydrofobowego charakteru powierzchni PTFE wynika z głębokości i wielkości porów. Przy pomiarach kątów zwilżania istotna jest również wielkość kropli. Najbardziej wiarygodne wyniki otrzymuje się dla kropli, gdy ciśnienie międzyfazowe pomiędzy kroplą a powietrzem i ciśnienie hydrostatyczne słupa badanej cieczy są zbliżone [Zdziennicka, K. Szymczyk, B. Jańczuk, R. Longwic, P. Sander, *Int. J. Adhesion Adhesives* 60 (2015) 23–30].

Interesujące wyniki Habilitantka uzyskała przy osadzaniu podwójnej warstwy organicznej na powierzchni krzemu i szkła (H4 i H5). W przypadku warstewek kopolimerów fluorowanego α -metylostyrenu ze styrenem na powierzchni szkła funkcjonalizowanego alkilosilanami Autorka stwierdziła korelację zmian zwilżalności wynikającą z obecności różnych ilości atomów fluoru w polimerze (H4).

W kolejnej publikacji (H3) dr Szwajca wykazała, na podstawie obliczeń kwantowo-chemicznych, znaczenie cyklodekstryn (CD) jako nanokontenerów związków organicznych w procesie samoorganizacji fluorowanych pochodnych aromatycznych. W tym przypadku podstawniki $-F$ i $-CF_3$ łatwo wnikają do hydrofobowego wnętrza β -CD i jej pochodnych.

Moim zdaniem bardzo ciekawe pod względem poznawczym i aplikacyjnym jest podsumowanie dotyczące materiałów hybrydowych na bazie otrzymanych nanoukładów (na str. 18 i 19 autoreferatu – załącznik nr 2a) (prace H1, H6–H8). Znaczącym osiągnięciem Habilitantki jest funkcjonalizacja nanodrutów InAs cząsteczkami polioligowinyli, co wpłynęło na wzrost przewodnictwa powierzchniowego, pomimo obecności wewnętrznego segmentu InP o długości 5 nm, który stanowił barierę energetyczną (praca H1). Z kolei modyfikacja powierzchni Si(001) alifatycznymi alkoholami polifluorowanymi o różnej długości łańcucha i różnej ilości atomów fluoru przy tej samej długości łańcucha (reakcja katalizowana światłem UV z dodatkiem β -CD) wpływa na wartość pracy wyjścia (praca H7).

Słabą stroną wniosku jest mało staranne i niedostateczne przemyślane przygotowanie dokumentacji. Habilitantka, oprócz przedłożonych prac załączyła 14 stronicowy autoreferat. Moim zdaniem brakuje tutaj omówienia aktualnego stanu wiedzy na podstawie trafnie dobranej bibliografii w połączeniu ze znaczeniem poznawczym i aplikacyjnym uprawianej tematyki. Autorka cytuje 5 przeglądowych artykułów, które zawierają 1346 odnośników literaturowych świadczących o znaczeniu systematycznych i kompleksowych badań materiałów i procesów zachodzących w nanoskali. W odniesieniu do tytułu rozprawy habilitacyjnej mało precyzyjnie sformułowany jest również cel pracy: "zbadanie i przedstawienie procesów fizykochemicznych zachodzących w nanoskali w aspekcie czysto chemicznym oraz wykorzystanie zdobytej wiedzy w projektowaniu i tworzeniu materiałów o nowych właściwościach".

Ocena działalności dydaktycznej

Dydaktyka zajmuje szczególne miejsce w działalności nauczyciela akademickiego, który ponosi odpowiedzialność za proces i jakość kształcenia na uczelniach wyższych, dlatego osiągnięcia dydaktyczne są bardzo istotne do przyznania samodzielności akademickiej. Dr Anna Szwajca jest zaangażowanym pracownikiem dydaktycznym i prowadzi różne formy zajęć ze studentami (zajęcia laboratoryjne i proseminaria) z chemii organicznej i analitycznej, chemii alkaloidów oraz nukleozydów i nukleotydów.

Od chwili zatrudnienia na stanowisku adiunkta dr A. Szwajca prowadziła wiele zajęć popularyzujących naukę: wiosenne warsztaty laboratoryjne dla szkół gimnazjalnych, tygodniowe pokazy dla uczniów szkół średnich i weekendowe pokazy dla przedszkolaków w Brunszwiku. Ponadto prowadziła zajęcia dla studentów studiów licencjackich kursu

Inżynierii Przemysłowej oraz Inżynierii Mechanicznej w Uniwersytecie Technicznym w Brunszawiku. Współpracowała z firmą Orlen w tworzeniu i prowadzeniu portalu popularnonaukowego www.poczujchemie.pl oraz prowadziła zajęcia w laboratorium chemii organicznej dla olimpijczyków szkół średnich.

Do jej działalności dydaktycznej należy zaliczyć opiekę naukową nad studentami wykonującymi prace licencjackie (8 osób) i magisterskie (9 osób). Jest również promotorem pomocniczym w przewodzie doktorskim, który ma być zakończony w 2016 roku. Wysokie kompetencje dr A. Szwajca jako nauczyciela akademickiego nie budzą wątpliwości.

Opinia o działalności organizacyjnej

Pani dr Anna Szwajca jest członkiem Polskiego Towarzystwa Chemicznego (od 2006 roku) oraz członkiem Wydziałowego Zespołu ds. Oceny Jakości Kształcenia w kadencji 2012–2016.

Podsumowanie i wniosek końcowy

Podsumowując całokształt działalności dr Anny Szwajca stwierdzam, że legitymuje się Ona dostatecznymi osiągnięciami w pracy naukowo-badawczej, w działalności dydaktycznej i organizacyjnej. W mojej opinii Pani Doktor spełnia w stopniu dostatecznym kryteria oceny aktualnie obowiązującej ustawy o stopniach i tytule naukowym. Wnioskuje więc o dopuszczenie dr Anny Szwajca przez radę Wydziału Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.



Lublin, 21.04.2016.