

Białystok, 10 stycznia 2019 r.

Profesor Krzysztof Winkler

Instytut Chemii

Uniwersytet w Białymstoku

Ciołkowskiego 1K

15-245 Białystok

winkler@uwb.edu.pl

Ocena rozprawy habilitacyjnej, dorobku naukowego oraz działalności dydaktycznej i organizacyjnej dr Agnieszki Janiak

Pani dr Agnieszka Janiak jest absolwentką Wydziału Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, gdzie w 2002 r. uzyskała stopień magistra chemii, broniąc prace na temat „*Rentgenograficzne badania struktury kryształów zawierających mostkowe kryształy difenowe*”. Promotorem pracy była Pani Profesor Urszula Rychlewska, późniejszy opiekun naukowy Pani Janiak. Pisząc pracę magisterską, Kandydatka poznała metodykę pomiarów i obiekty swoich badań, organiczne kryształy molekularne, które będą przedmiotem jej prac w przyszłych latach. Bezpośrednio po obronie pracy magisterskiej podjęła studia doktoranckie na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Tematyka pracy doktorskiej dotyczyła „*Badania słabych oddziaływań specyficznych i zjawiska inkluzji w kryształach organicznych*”. Promotorem przewodu doktorskiego, podobnie jak wcześniej w przypadku pracy magisterskiej, była Pani Profesor Urszula Rychlewska. Rozprawa doktorska została obroniona w 2008 roku. Po uzyskaniu stopnia doktora Pani Agnieszka Janiak przebywała na 2-letnim stażu naukowym na Uniwersytecie Stelenbosch w zespole prof. Leonarda Barboura. Jej zagraniczny staż realizowany w ramach projektu badawczego „*Molecular Solids for Gas Sorption*” finansowany był przez Narodową Fundację Badawczą Republiki Południowej Afryki. Od 2008 roku Kandydatka zatrudniona jest na stanowisku adiunkta na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu.

Tematyka prac badawczych Pani dr Agnieszki Janiak, podjęta po obronie doktoratu, związana jest z badaniami strukturalnymi kryształów molekularnych związków organicznych. Prace te dotyczyły określenia wpływu podstawników na strukturę i właściwości kryształów. Wkład Pani Janiak w te badania obejmował pomiary dyfrakcyjne oraz analizę strukturalną tworzonych układów. Nie ulega wątpliwości, że był to bardzo znaczący udział, niejednokrotnie decydujący dla poprawnej interpretacji wyników badań. Rezultaty jej prac stały się podstawą wielu współautorskich publikacji, wśród których na uwagę zasługuje praca opublikowana w *Acta Crystallographica B* **62**, 2006, 135-142, dotycząca wpływu rozpuszczalnika oraz podstawników w pierścieniu benzoaldehydowym na strukturę molekularnych kryształów imidazopirydynowych. Inny kierunek badań dotyczył udziału słabych oddziaływań specyficznych z udziałem elektronów π na strukturę kryształów

molekularnych. Wyniki prac Kandydatki pozwoliły zaproponować strukturę kryształów imidazopirydynowych, w których występowało oddziaływanie π - π^* (*Journal of Physical Chemistry A* **109**, 2005, 4568-4574). Najciekawsze jednakże zagadnienia realizowane przez Kandydatkę w okresie poprzedzającym uzyskanie stopnia doktora obejmował badania strukturalne układów z udziałem chiralnych makrocyklicznych alifatycznych oligomerów. Tematyce tej poświęcone są dwie ważne prace opublikowane w *Chemistry – A European Journal* **12**, 2006, 1807-1817 oraz **13**, 2007, 8688-8695.

Tematyka zainicjowana w tych dwóch publikacjach, dotycząca struktur krystalicznych, właściwości inkluzyjnych oraz właściwości sorpcyjnych makrocyklicznych związków organicznych zdominuje przyszłe prace Kandydatki. Przedmiotem jej badań będą przede wszystkim kryształy molekularne trianglamin, trianglimin, kaliksalenów oraz tiakaliks[4]arenów o strukturze porowatej. Tematyka ta była również realizowana podczas pobytu Pani dr Janik na stażu naukowym w Uniwersytecie Stelensbosch w RPA. Zagadnienia te są przedmiotem osiągnięcia naukowego Pani dr Agnieszki Janiak, które Habilitantka definiuje jako „*Organiczne związki makrocykliczne jako prekursory nowych materiałów porowatych*”. Osiągnięcie naukowe obejmuje cykl dziewięciu wieloautorskich prac opublikowanych w czasopiśmie z listy filadelfijskiej. Są to publikacje powstałe zarówno przy udziale prof. Barboura jak i publikacje autorstwa tylko pracowników UAM w Poznaniu. We wszystkich pracach decydujące znaczenie mają wyniki badań strukturalnych, przeprowadzonych i zinterpretowanych przez Habilitantkę. Badania trianglamin opisane w pracy opublikowanej w *Crystal Growth & Design* **16**, 2016, 2779-2788 dotyczyły struktury kryształów molekularnych tworzonych w środowisku alkoholi alifatycznych. Habilitantka zaobserwowała wpływ zarówno rzędowości alkoholu jak i długości łańcucha na strukturę tworzonych kryształów molekularnych. W przypadku alkoholi pierwszorzędowych cząsteczki trianglamin tworzą połączenia inkluzyjne, w których cząsteczki gospodarza układają się w równoległe stopy. Takie ułożenie trianglamin prowadzi do tworzenia wolnych przestrzeni wewnątrz kryształu nadając mu cech porowatości. Krystalizacja ze środowiska alkoholi trzeciorzędowych prowadzi natomiast do tworzenia kryształów pozbawionych rozpuszczalnika. Cząsteczki trianglamin ułożone są również w stopy i posiadają strukturę porowatą. Taka struktura umożliwia inkluzję niewielkich cząsteczek związków organicznych i tworzenie połączeń typu gość-gospodarz.

Kryształy molekularne triangliminy wykazywały natomiast interesujące właściwości termiczne (*Chemical Communications* **54**, 2018, 3727-3730). Układy te krystalizując wykazują tendencję do samoorganizacji w stopy, wewnątrz których znajdują się jednowymiarowe kanały. Dla jednej z form krystalicznych Habilitantka zaobserwowała możliwość odwracalnego przejścia fazowego, któremu towarzyszyła bardzo wysoka rozszerzalność cieplna.

Zdecydowana większość publikacji wchodzących w skład osiągnięcia naukowego dotyczy badań strukturalnych kaliksalenów. Habilitantka trafnie przewidziała, opierając się na budowie tych układów makrocyklicznych oraz opublikowanych w literaturze wstępnych doniesieniach, że układy te krystalizując będą tworzyły mikroporowate struktury. W swoich pracach Pani dr Janiak skupiła przede wszystkim uwagę na określeniu warunków decydujących o tworzeniu określonych struktur krystalicznych. Habilitantka ustaliła między

innymi zależność pomiędzy tworzącymi się strukturami kryształów molekularnych kaliksalenów a modyfikacją pierścieni aromatycznych. Rozmiar i polarność podstawników wprowadzanych do pierścieni aromatycznych mają w tym przypadku decydujący wpływ na strukturę tworzących się kryształów molekularnych. Kaliksaleny, w których pierścień aromatyczny modyfikowany był podstawnikami chlorkowymi oraz bromkowymi tworzyły kryształy makromolekularne wykazujące tendencje do absorpcji małych cząsteczek gazowych, takich jak CO₂, N₂, C₂H₄, CH₄ (*Supramolecular Chemistry* **30**, 2018, 479-487).

Ciekawą pracą jest artykuł opublikowany w *Chemical Communications* **50**, 2014, 15509-15512 wchodzący w skład osiągnięcia naukowego, a dotyczący dyfuzji cząsteczek HCl i I₂ poprzez luki molekularne w kryształach tiakaliks[4]arenu. Habilitantka wykazała, że dyfuzja cząsteczek polarnych i niepolarnych w tych kryształach przebiega różnymi drogami (kanałami). Ten dyfuzyjny transport jest możliwy dzięki zdolności cząsteczek gospodarza do krótkotrwałych zmian strukturalnych w sąsiedztwie cząsteczek dyfundujących.

Omawiając zbiór publikacji tworzących osiągnięcie naukowe wysoko ocenić należy zarówno dobór układów do badań jak i metodologię pomiarów. Zbiór przedstawionych do recenzji prac jest niewątpliwie bardzo logicznie zaplanowany, a badane układy poprawnie dobrane, uwzględniając ich przewidywane struktury i właściwości. Uzyskane wyniki badań wypełniają stosunkowo słabo poznany obszar wiedzy obejmujący mikroporowate kryształy molekularne z udziałem struktur makrocyklicznych. Podjęte przez Panią dr Janiak badania dotyczyły niewątpliwie układów ważnych, przede wszystkim ze względu na aspekty poznawcze. Efekt praktyczny tych badań, czasami podkreślany przez Habilitantkę w omówieniu osiągnięcia naukowego, jest moim zdaniem mocno ograniczony ze względu na charakter molekularny kryształów. Publikacje współautorstwa Pani dr Janiak stanowią bez wątpienia istotny wkład w rozwój tego obszaru badań. Największą wartością w tych pracach stanowią badania strukturalne, przeprowadzone przez Habilitantkę, oraz poprzedzające je prace syntetyczne. Nieco mniej entuzjastycznie oceniam natomiast wyniki badań właściwości sorpcyjnych tworzonych struktur. Mają one raczej charakter badań wstępnych i wymagają niewątpliwie dalszych prac pozwalających ustalić mechanizm sorpcji oraz czynniki wpływające na energię wiązania sorbowanych cząsteczek przez kryształy molekularne.

Poza uwagami dotyczącymi zakresu analizy wyników badań sorpcyjnych nie mam zastrzeżeń merytorycznych do omawianych publikacji i zasadniczo zgadzam się z wnioskami i interpretacją rezultatów badań przedstawionych w tych pracach. Wyniki badań prezentowanych w publikacjach włączonych do osiągnięcia naukowego zostały usystematyzowane oraz przedyskutowane w załączonym komentarzu. Czytając go, odniosłem jednak wrażenie, że był on w dużej mierze powtórzeniem informacji z oryginalnych artykułów. Oczekiwałem, że Autorka więcej uwagi poświęci usystematyzowaniu wyników i porównaniu wyników badań. Trochę skromnie prezentuje się również plan dalszych prac Habilitantki, przedstawiony bardzo skrótowo na końcu podsumowania w komentarzu. Niepokój może budzić brak pomysłów badań nowych układów wykraczających swoją budową i właściwościami poza makromolekularne układy cykliczne badane do tej pory.

Prace wchodzące w skład osiągnięcia naukowego opublikowane zostały w bardzo dobrych czasopiśmie o wysokim współczynniku oddziaływania. Wszystkie te publikacje są wieloautorskie. Pani dr Agnieszka Janiak jest pierwszym autorem w większości z tych publikacji. Jest ona również autorem korespondującym w siedmiu pracach. Nie ulega zatem

wątpliwości, że udział Habilitantki w ich powstaniu był dominujący, szczególnie w zakresie badań strukturalnych. Wynika to również z załączonych oświadczeń współautorów, które wskazują na bardzo znaczący udział Pani dr Janiak w sformułowaniu koncepcji badań, oraz ich realizacji i interpretacji. Prace wchodzące w skład osiągnięcia naukowego Pani dr Agnieszki Janiak w większości pochodzą z ostatnich 2 lat. Może to tłumaczyć stosunkowo niską liczbę cytowań. Trzeba natomiast podkreślić, że prace wcześniejsze, na przykład *Organic & Biomolecular Chemistry* **14**, 2016, 669-673 czy *Chemical Communications* **50**, 2014, 15509-15512, wzbudziły spore zainteresowanie i były odpowiednio 14 i 9 razy cytowane (Web of Science).

Podsumowując, publikacje tworzące osiągnięcie naukowe stanowią znaczący wkład w badania strukturalne kryształów molekularnych związków makrocyklicznych. Uważam, że spełnione są w tym zakresie kryteria stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego.

Oprócz prac będących podstawą osiągnięcia naukowego, Pani dr Agnieszka Janiak jest współautorką dalszych 28 publikacji z lity filadelfijskiej. Szesnaście spośród nich ukazało się po uzyskaniu przez nią stopnia doktora. We wszystkich tych pracach udział Habilitantki sprowadzał się do badań struktury monokryształów syntezowanych związków. W większości tych prac, deklarowany przez Habilitantkę udział jest bardzo znaczący, a czasami nawet dominujący. W dorobku Kandydatki z zakresu tej tematyki znajdują się artykuły publikowane w znaczących czasopismach, takich jak *Green Chemistry*, *ChemPhysChem* czy *Organic & Biomolecular Chemistry*. Omawiając ten obszar badań Habilitantki na uwagę zasługują artykuły opublikowane w *Tetrahedron* **74**, 2018, 975-986 oraz *Arabian Journal of Chemistry* 2018, które dotyczą syntezy i badań strukturalnych perfluorofenyłowych pochodnych kwasów aminofosforowych. Współpracując z irańską grupą badawczą kierowaną przez prof. Eshtiagh-Hosseinię przeprowadziła również badania strukturalne szeregu kryształów kompleksów metali przejściowych z pochodnymi kwasów dikarboksyłowych oraz hydroksykarboksylowych (*Journal of Molecular Structure* **1083**, 2015, 460-470 oraz *Acta Crystallographica E* **68**, 2012, m358-m386).

Trochę niepokoi jednak brak w dorobku Habilitantki pracy o charakterze przeglądowym, która pokazałaby umiejętności w syntetycznej i krytycznej ocenie badań w ramach obszaru jej zainteresowań naukowych. Prace Pani Agnieszki Janiak były ponad 270 razy cytowane. Indeks Hirscha wynosi 10. Biorąc pod uwagę jej staż naukowy, wskaźniki te należy ocenić umiarkowanie pozytywnie. Wyniki prac Habilitantki były wielokrotnie prezentowane na konferencjach o zasięgu krajowym i międzynarodowym. Była współautorką dwudziestu pięciu wystąpień ustnych oraz siedmiu prezentacji posterowych. Wygłosiła również dwa referaty konferencyjne na zaproszenie organizatorów.

Podsumowując mogę stwierdzić, że dorobek naukowy Pani dr Agnieszki Janiak, który nie został włączony do rozprawy habilitacyjnej jest znaczący, a co ważniejsze przeważająca jego część została osiągnięta po uzyskaniu przez nią stopnia doktora. Uważam, że Habilitantka posiada dorobek naukowy spełniający kryteria stawiane kandydatom do uzyskania stopnia naukowego doktora habilitowanego.

Działalność dydaktyczna Habilitantki obejmuje zajęcia laboratoryjne dla studentów I i II stopnia kierunków chemii z zakresu chemii fizycznej, krystalizacji i analizy rentgenograficznej. Była ona promotorem dwóch licencjatów oraz opiekunem trzech prac magisterskich. Pracując na Wydziale Chemii UAM w Poznaniu, była wykonawcą szeregu projektów badawczych. Szkoda, że w żadnym z nich nie spełniała roli kierownika. Uzyskała natomiast 2-letni grant finansowany przez National Research Foundation of South Africa na badania własne dotyczące molekularnych kryształów wykazujących właściwości sorpcji gazów.

Z załączonych materiałów wynika, że Pani Agnieszka Janiak nie rozwinęła w pełni swoich talentów organizacyjnych. W tym zakresie może się jedynie pochwalić funkcją opiekuna roku kierunku Chemia oraz udziałem w Wydziałowej Komisji Wyborczej 2016-2020. Może to i dobrze, bo miała więcej czasu na pracę naukową, a ta przyniosła rzeczywiście dobre rezultaty.

Podsumowując recenzję stwierdzam, że Pani dr Agnieszka Janiak zgromadziła dorobek naukowy spełniający kryteria stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego. Wyniki badań, których była głównym autorem stanowią znaczący wkład w badania strukturalne kryształów związków makrocyklicznych. Wyniki jej prac krystalograficznych stanowiły też znaczący wkład w szereg innych projektów realizowanych w różnych zespołach badawczych Wydziału Chemii UAM w Poznaniu. Niejednokrotnie decydowały one o wysokim poziomie naukowym tych prac. Wnioskuje zatem do Rady Wydziału Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu o dopuszczenie Pani dr Agnieszki Janiak do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.



Krzysztof Winkler

