



Wrocław, 19.10.2016

**Recenzja dorobku dr Ewy Krystkowiak w postępowaniu nadania stopnia
naukowego doktora habilitowanego z zakresu chemii**

Podstawą recenzji w postępowaniu habilitacyjnym i oceny dorobku naukowego oraz dydaktycznego dr Ewy Krystkowiak z Wydziału Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu jest autoreferat opisujący jednolity cykl publikacji pt. „Wpływ międzycząsteczkowych wiązań wodorowych na właściwości spektralne i fotofizyczne”, zestaw informacji na temat aktywności Kandydatki a także kopie opublikowanych prac naukowych stanowiące podstawę wniosku habilitacyjnego.

Dr Ewa Krystkowiak jest związana zawodowo z Wydziałem Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Po ukończeniu studiów w 1993 roku aż do 1996 roku była zatrudniona na stanowisku technika na etacie inżyniersko-technicznym. W latach 1996 – 2000 była doktorantką. Natomiast w latach 2000 – 2003 była zatrudniona na etacie starszego specjalisty. Począwszy od 2003 roku dr Ewa Krystkowiak jest zatrudniona jako pracownik naukowo-dydaktyczny na etacie adiunkta. W 2001 roku obroniła pracę doktorską pt. „Badanie kinetyki wygaszania fluorescencji tioketonów w stanie S_2 w czasach pikosekundowych” wykonaną pod kierunkiem prof. dr hab. Andrzeja Maciejewskiego.

Po uzyskaniu stopnia naukowego doktora Habilitantka w dalszym ciągu koncentrowała się na badaniu właściwości układów molekularnych w elektronowych stanach wzbudzonych. Całkowity dorobek to 26 prac naukowych z czego 17 prac zostało opublikowanych w czasopismach z listy filadelfijskiej a 9 prac w innych czasopismach. W sumie po doktoracie Habilitantka opublikowała 24 prace, przy czym 15 prac w czasopismach z listy filadelfijskiej. Do dorobku naukowego należy zaliczyć prezentacje na konferencjach naukowych. Jednakże w większości rezultaty badań były prezentowane na konferencjach krajowych. Olbrzymia szkoda, że Habilitantka mając bardzo interesujące wyniki na temat wiązań wodorowych w elektronowych stanach wzbudzonych nigdy ich nie prezentowała np. na forum cyklicznych międzynarodowych konferencji naukowych zatytułowanych „Horizons in Hydrogen Bond Research”, a więc na forum naukowym jak najbardziej dedykowanym badaniom prezentowanym przez Habilitantkę.

Większość opisanych w literaturze badań eksperymentalnych a także teoretycznych opartych na obliczeniach metodami chemii kwantowej głównie koncentruje się na badaniach

układów z wiązaniem wodorowych w elektronowym stanie wzbudzonym. Dlatego z olbrzymią przyjemnością podjąłem się recenzji osiągnięcia naukowego w postępowaniu habilitacyjnym dr Ewy Krystkowiak pt. „Wpływ międzycząsteczkowych wiązań wodorowych na właściwości spektralne i fotofizyczne” które dotyczą badań międzycząsteczkowych wiązań wodorowych między cząsteczką substancji rozpuszczonej i rozpuszczalnikiem w elektronowym stanie podstawowym i elektronowych stanach wzbudzonych. Należy również nadmienić, że badania układów w elektronowych stanach wzbudzonych są niezwykle istotne np. przy projektowaniu nowych materiałów oraz w nanotechnologiach.

Podstawą wniosku o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego dr Ewy Krystkowiak z zakresu chemii stanowi cykl 8 monotematycznych prac opublikowanych w latach 2006 - 2016 w bardzo dobrych czasopismach z listy filadelfijskiej, a mianowicie: *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry* (1 praca), *PhysChemPhys* (2 prace), *Physical Chemistry Chemical Physics* (3 prace), *Photochemical & Photobiological Sciences* (1 praca) i *Dyes Pigments* (1 praca). Wszystkie prace są wieloautorskie. Jednakże w 7 pracach dr Ewa Krystkowiak jest autorem korespondencyjnym. Ponadto, na podstawie załączonych oświadczeń pozostałych współautorów a także określonego przez Habilitantkę własnego wkładu w realizację badań przedstawionych w cyklu prac uważam, że jej rola była wiodąca i nie mam w tym punkcie żadnych zastrzeżeń.

Z olbrzymim uznaniem oceniam przedstawiony przez dr Ewę Krystkowiak dorobek zgłoszony do osiągnięcia naukowego w postępowaniu habilitacyjnym. Habilitantka skoncentrowała się na określeniu roli międzycząsteczkowych wiązań wodorowych tworzonych między substancją rozpuszczoną i cząsteczkami rozpuszczalnika w elektronowym stanie podstawowym i elektronowych stanach wzbudzonych. Przedmiotem badań były takie związki o właściwościach donoro-akceptorowych jak: 4-aminoftalimid, 4-amino-N-metylo-ftalimid, 7-aminokumaryna (kumaryna-120 i kumaryna-151), 6-aminokumaryna a także tioksanton i benzopirantion. Uważam, że dokonany przez Habilitantkę wybór układów molekularnych jest niezwykle trafny ponieważ te cząsteczki mogą być stosowane np. jako sondy molekularne w badaniach bardziej złożonych układów.

W opublikowanych pracach w sposób niezwykle umiejętny połączono badania doświadczalne z rezultatami obliczeń zaawansowanymi metodami chemii kwantowej. W rezultacie Habilitantka mogła dokonać dosyć głębokiej analizy badanych procesów.

W monotematycznym cyklu prac przedstawiono szereg ważnych i nowatorskich wyników, o czym świadczy ranga naukowa czasopism w których zostały opublikowane. W

swojej recenzji chciałbym wspomnieć tylko o moim zdaniem najważniejszych rezultatach. Jako niezwykle ważne osiągnięcie uważam zaproponowanie nowej i dokładnej metody wyznaczania zmian energii wiązań wodorowych między substancją rozpuszczoną i rozpuszczalnikiem w wyniku przejść pomiędzy stanami elektronowymi wyłącznie w oparciu o wyniki pomiarów spektralnych absorpcyjnych i emisyjnych. Jest to stosunkowo prosta metoda dająca wiarygodne wyniki.

W pracach [H1, H3, H4, H6] dr Ewa Krystkowiak wykazała, że nie zmiany momentu dipolowego w wyniku wzbudzenia elektronowego, jak dotychczas sądzono w literaturze, a właśnie zmiany energii międzycząsteczkowych wiązań wodorowych są odpowiedzialne za obserwowane zmiany spektralne, wartości wydajności kwantowych a także czasów życia emisji. Również pionierską w literaturze światowej jest praca [H3], w której Habilitantka wykazała, że w wyniku wzbudzenia elektronowego $S_0 \rightarrow S_1$ jest osłabienie wiązania wodorowego pomiędzy atomem azotu grupy aminowej cząsteczki aminokumaryny z cząsteczkami protycznych rozpuszczalników.

W pracach [H5, H8] Habilitantka wykazała, że cząsteczki benzopirantionu (BPT) tworzą niezwykle silne wiązania wodorowe z cząsteczkami wody zarówno w stanie podstawowym jak również w stanie wzbudzonym $S_2(\pi, \pi^*)$. W konsekwencji, za emisję ze stanu S_2^{ref} odpowiedzialne są wyłącznie kompleksy BPT-woda a nie jak wcześniej sugerowano w literaturze cząsteczki S_2 -BPT.

Również bardzo istotnym wnioskiem wynikającym z badań Habilitantki jest stwierdzenie, że podobieństwo widm absorpcyjnych i/lub emisyjnych badanego układu molekularnego w rozpuszczalnikach oddziaływujących specyficznym poprzez wiązanie wodorowe i rozpuszczalnikach oddziaływujących niespecyficznym wcale nie musi oznaczać braku tworzenia trwałych kompleksów substancja rozpuszczona – rozpuszczalnik [prace H4, H5 i H8].

Dr Ewa Krystkowiak również uzyskała wiele bardzo wartościowych rezultatów badań w pracach, które nie wchodziły do monotematycznego cyklu publikacji. Na szczególną uwagę zasługują publikacje opisujące badania szybkich dwucząsteczkowych procesów zależnego od czasu wygaszania fluorescencji, a w szczególności zastosowanie z powodzeniem do opisu kinetyki procesu wygaszania modelu Smoluchowskiego-Collinsa-Kimballa. Również niezwykle ważnym elementem dorobku naukowego Habilitantki są badania właściwości spektralnych i fotofizycznych cieczy jonowych.

Przy ocenie działalności Kandydata do stopnia naukowego doktora habilitowanego, poza dorobkiem naukowym, bardzo istotny jest również dorobek w zakresie działalności

organizacyjnej i dydaktycznej. Habilitantka aktywnie uczestniczyła w działalności organizacyjnej na rzecz macierzystego Wydziału. W 2005 roku była członkiem Wydziałowej Komisji Rekrutacyjnej dla naboru kandydatów na I rok studiów. Od 2012 roku jest przedstawicielem nauczycieli akademickich w Radzie Wydziału Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Również od 2012 roku jest kierownikiem Pracowni Izotopowej i przyczyniła się do modernizacji tej pracowni.

Z informacji przedstawionej przez Habilitantkę wynika, że również aktywnie uczestniczyła w działalności dydaktycznej. Prowadziła zajęcia dydaktyczne dla studentów I i II stopnia studiów z chemii jądrowej, chemii fizycznej i spektroskopii. Jest autorką skryptu pt. „Uwaga promieniowanie, skrypt do ćwiczeń z chemii jądrowej i ochrony radiologicznej” wydanego przez Wydawnictwo Naukowe UAM w 2012 roku. W latach 2006 – 2008 była opiekunką trzech prac magisterskich, natomiast w latach 2011 – 2015 opiekunką doktorantki. Za działalność dydaktyczną została uhonorowana nagrodą zespołową II stopnia w 2015 roku.

W podsumowaniu stwierdzam, że wysoko oceniam dorobek naukowy, a w szczególności monotematyczny cykl prac pt. „Wpływ międzycząsteczkowych wiązań wodorowych na właściwości spektralne i fotofizyczne” przedstawiony w postępowaniu habilitacyjnym. Dr Ewa Krystkowiak wykazała niezwykle ważną rolę międzycząsteczkowych wiązań wodorowych tworzonych pomiędzy cząsteczkami substancji rozpuszczonej i rozpuszczalnika w elektronowych stanach podstawowym i wzbudzonych. Sumaryczny *impact factor* (IF) prac opublikowanych w czasopiśmie z listy filadelfijskiej wynosi 49,938. Jej prace zostały zauważone w literaturze światowej o czym świadczy liczba 198 cytowań (bez autocytowań). Wartość indeksu Hirscha równa jest 10. Praca H1 już była cytowana 46 razy.

Biorąc pod uwagę nowatorską problematykę badawczą a także wysoki poziom badań naukowych przedstawionych w postępowaniu habilitacyjnym w konkluzji stwierdzam, że przedstawione przez dr Ewę Krystkowiak osiągnięcie naukowe spełnia wszystkie warunki stawiane w postępowaniu habilitacyjnym a określone w *Ustawie o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz stopniach i tytule w zakresie sztuki* z dnia 14 marca 2003 r. (Dz.U. z dnia 22 grudnia 2014 r. poz. 1852 wraz z późniejszymi zmianami) i wnoszę o dopuszczenie Ewy Krystkowiak do dalszych etapów związanych z postępowaniem habilitacyjnym.

prof. dr hab. Zdzisław Latajka