

**Ocena dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego
dr Agnieszki Held w związku z postępowaniem w sprawie nadania
stopnia doktora habilitowanego**



UNIwersytet
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

1. Ocena formalna wniosku

W związku z prowadzonym postępowaniem w sprawie nadania stopnia dra habilitowanego Pani Agnieszce Held na podstawie rozprawy zatytułowanej „*Katalityczne utlenianie propenu i propanu tlenkiem azotu(I) na sitach molekularnych modyfikowanych metalami przejściowymi*” otrzymałem do oceny zestaw dokumentów obejmujący: wniosek o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego, autoreferat (w polskiej i angielskiej wersji językowej), zawierający podstawowe informacje o Habilitantce, zestawienie tytułów prac, wchodzących w cykl publikacji objętych postępowaniem habilitacyjnym z podaniem udziału własnego oraz wartości współczynnika oddziaływania, dane bibliometryczne Kandydatki, wykaz jej całkowitego dorobku naukowego i udziału w konferencjach wraz z informacją o osiągnięciach organizacyjnych, dydaktycznych, współpracy naukowej. Do dokumentacji zostały również dołączone kopie artykułów, wchodzących w skład cyklu habilitacyjnego oraz oświadczenia współautorów określające ich wkład w powstanie tych publikacji.

Wydział Chemii

Wymienione dokumenty zostały przygotowane starannie, a zawarte w nich informacje pozwalają na dokonanie oceny dorobku naukowego, dydaktycznego oraz organizacyjnego Kandydatki. Recenzowana praca i dołączone dokumenty spełniają, zatem wymogi formalne określone Rozporządzeniem Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 10. listopada 2015 r.

2. Podstawowe informacje o Kandydatce

Dr Agnieszka Held jest absolwentką Uniwersytetu Adama Mickiewicza w Poznaniu, gdzie na Wydziale Chemii studiowała w latach 1994-1999, a następnie odbyła studia doktoranckie (1999-2003). Stopień doktora nauk chemicznych uzyskała w 2003 r. na podstawie rozprawy zatytułowanej „*Zeolity modyfikowane metalami przejściowymi jako katalizatory utleniania węglowodorów*”. Promotorem pracy doktorskiej, była prof. dr hab. Krystyna Nowińska. Warto podkreślić, iż obie prace, magisterska i doktorska, zostały wyróżnione.

Od 2003 r. dr A. Held pracuje w Zakładzie Technologii Chemicznej Wydziału Chemii UAM na stanowisku adiunkta (z 2-krotną przerwą na urlop macierzyński). W trakcie dotychczasowej kariery naukowej Habilitantka odbyła dwa krótkie staże (5 i 1 miesięczny) na zaproszenie prof. Wilhelma Schwiegera w *Friedrich-Alexander-Universität* w Erlangen oraz staż dydaktyczny w ramach programu Erasmus we Włoszech na *University of Calabria, Department of Environmental and Chemical Engineering*.

ul. Ingardena 3

PL 30-060 Kraków

tel. +48(12) 633 63 77

fax +48(12) 634 05 15

sekretar@chemia.uj.edu.pl

www.chemia.uj.edu.pl

3. Ocena dorobku naukowego

Informacje bibliometryczne dotyczące dorobku naukowego Kandydatki wskazują, iż łącznie opublikowała ona 26 artykułów w czasopismach o cyrkulacji międzynarodowej (baza JCR), 22 z nich po uzyskaniu doktoratu. Publikacje te ukazały się w czasopismach o zróżnicowanym współczynniku oddziaływania. Wśród nich znajdują się prace opublikowane w czołowych czasopismach z zakresu katalizy, takich jak *Applied Catalysis A i B*, *J. Catalysis*, *Catalysis Science Technology*, czy też *J. Phys. Chem. C*. Na podkreślenie zasługują licznie cytowane artykuły opublikowane w czasopiśmie *Applied Catalysis A*. Dorobek ten uzupełnia 19 publikacji w czasopismach spoza bazy JCR. W dorobku brak jest patentów czy też zgłoszeń patentowych, których, biorąc pod uwagę Zakład Technologii Chemicznej, gdzie Kandydatka jest zatrudniona, można by oczekiwać.

Aktywność naukowa Kandydatki jest zadawalająca lecz niezbyt intensywna, publikuje ona ok. dwóch prac rocznie. Wszystkie publikacje były cytowane 404 razy (356 bez autocytowań), co daje przeciętnie ponad 13 cytowań na pracę i umiarkowaną liczbę cytowań sięgającą 30-40 rocznie w ostatnim okresie. Łączny współczynnik oddziaływania (5-letni IF) tych prac przekracza wartość 59. Warty odnotowania jest znaczący, jak na ten etap rozwoju kariery naukowej, indeks Hirscha, $h = 11$. Ponadto dr Agnieszka Held jest współautorką licznych (101) prezentacji na konferencjach naukowych, w tym 22 doniesień ustnych, w większości na konferencjach niższej rangi. W dorobku Kandydatki brak jest wykładów na zaproszenie wygłoszonych poza granicami kraju, co sprawia, iż dorobek konferencyjny, choć liczbowo pokaźny, jakościowo jest wciąż dość ubogi. Podobna uwaga dotyczy sporadycznych recenzji wykonywanych przez dr A. Held dla międzynarodowych czasopism, ich liczba jest stosunkowo mała (13) biorąc pod uwagę kilkunastoletni okres aktywności naukowej Habilitantki. Dr Agnieszka Held była głównym wykonawcą i wykonawcą 7. krajowych projektów badawczych oraz kierownikiem 2. projektów finansowanych przez MNiSzW oraz NCN. Jej dokonania na tym polu są zatem godne podkreślenia i w zupełności spełniają oczekiwania stawiane habilitantom.

Wśród uzyskanych ważniejszych wyróżnień dr Agnieszki Held należy odnotować prestiżowe roczne stypendium Krajowej Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej – program START (dwukrotnie w latach 2005 i 2006), Stypendium Naukowe Miasta Poznania (2005) oraz Nagrodę Rektora UAM za osiągnięcia w pracy naukowej, dydaktycznej i organizacyjnej (2007).

Powyższe dane wskazują, iż dorobek naukowy dr Agnieszki Held jest zadawalający. Kandydatka publikuje w znanych czasopismach katalitycznych o cyrkulacji międzynarodowej. Łączna liczba publikacji, jak i ich istotność naukowa, mierzona wartością współczynnika IF, liczbą cytowań oraz indeksem Hirscha są na przyzwoitym poziomie. W swojej dziedzinie badawczej dr A. Held cieszy się dobrą rozpoznawalnością naukową w kraju, zaczyna być również stopniowo rozpoznawalna w skali międzynarodowej. Na podkreślenie zasługuje zaangażowanie Kandydatki w realizację wielu projektów badawczych, a zwłaszcza kierowanie dwoma z nich. Niepotrzebny kontrast w jej dorobku stanowią zbyt liczne publikacje w słabych czasopismach oraz nazbyt pasywna działalność konferencyjna.

Ocena osiągnięć naukowych cyklu habilitacyjnego

Podstawę habilitacji dr Agnieszki Held, zatytułowanej „*Katalityczne utlenianie propenu i propanu tlenkiem azotu(I) na sitach molekularnych modyfikowanych metalami przejściowymi*”, stanowi cykl 8 wielo-autorskich prac o łącznym współczynniku oddziaływania 36.4 oraz wartej podkreślenia dość wysokiej jego wartości średniej IF = 4.56. Ukazały się one w latach 2009-2019 w czasopiśmie katalitycznych w większości o dobrej renomie (rozpiętość współczynnika oddziaływania mieści się w zakresie od 2,5 do 7,5). Przedstawiony cykl prac jest spójny tematycznie i dostarcza istotnych danych odnośnie zastosowania nośnikowych katalizatorów tlenkowych (V, Nb, Ta) w reakcjach selektywnego utleniania propenu [H1], wyjaśnienia wpływu właściwości nośnika katalizatorów wanadowych na procesy epoksydacji i utleniania propenu [H2-H6], określenia struktury wanadowych centrów aktywnych [H2-H7], wy tłumaczenia roli modyfikatorów alkalicznych w procesie epoksydacji propenu oraz zastosowania katalizatorów wanadowych do reakcji bezpośredniego utleniania propanu do tlenku propylenu z zastosowaniem N₂O jako utleniacza [H8].

Z załączonych oświadczeń współautorów można wnioskować, że we wszystkich przypadkach udział Habilitantki w ich powstaniu był dominujący, co pośrednio potwierdza również fakt, iż dr A. Held w każdej z 8 prac cyklu była autorem korespondującym, a w 7 pierwszym. Z analizy autoreferatu i przedstawionych publikacji wynika również, iż Habilitantka potrafiła rozwinąć własną tematykę badawczą, uzyskując oryginalne wyniki. Przedstawiony cykl publikacji habilitacyjnych spełnia zatem oczekiwania zarówno, co do liczby prac, ich merytorycznego znaczenia, jak i rangi czasopism w których zostały one opublikowane.

Opisane w autoreferacie badania dr A. Held, będące podstawą jej rozprawy habilitacyjnej, zasadniczo dotyczyły opracowania heterogenicznych katalizatorów, zawierających metale przejściowe grupy V osadzone na krzemionkowych mezoporowatych sitach molekularnych, przeznaczonych do utleniania propenu i propanu. Spośród badanych metali najaktywniejsze okazały się układy wanadowe i badaniom ich właściwości fizyko-chemicznych i aktywności katalitycznej poświęcono większość prac z przedstawionego cyklu. Ich celem było początkowo opracowanie optymalnych warunków przygotowania wanadowych katalizatorów do epoksydacji propenu oraz wyjaśnienie natury centrów aktywnych odpowiedzialnych za selektywne utlenianie propenu. W kolejnym kroku optymalizacji katalizatorów wanadowych dr A. Held przeprowadziła badania nad wpływem rodzaju nośnika na aktywność katalityczną, wykazując, iż spośród kilku typowych tlenków SiO₂, Al₂O₃, MgO i TiO₂, układ VO_x osadzony mezo- i mikroporowatej (~2nm) krzemionce daje najlepsze rezultaty. Istotnymi parametrami wpływającym na aktywność katalityczną w reakcji epoksydacji są również stopień pokrycia powierzchni kompleksami wanadowymi, kontrolowany przez gęstość powierzchniowych grup hydroksylowych oraz energia wiązania V-O-nośnik. Oryginalny wkład własny Habilitantki polegał zaproponowaniu mechanizmu reakcji selektywnego utleniania, w którym kluczową rolę odgrywa sposób ligacji podtlenku azotu ($\eta^1\text{-N}$ vs $\eta^1\text{-O}$). Niemniej jednak dość rutynowa charakterystyka fizykochemiczna badanych układów sprawia pewien niedosyt na tle obecnego stanu wiedzy. Brakuje bowiem jednoznacznego potwierdzenia sposobu wiązania N₂O z centrum wanadowym, który odgrywa tak istotną rolę w zaproponowanym mechanizmie (np. przez zastosowanie znakowania izotopowego).

Następnym etapem optymalizacji katalizatorów wanadowych było sprawdzenie wpływu lokalizacji izolowanych centrów wanadowych w miejscach pozasiłkowych i sieciowych zeolitu SiBEA wybranego jako nośnik (seria katalizatorów VxSiBEA(I) i VxSiBEA(II)). Drugim rodzajem katalizatorów badanych w tym kontekście była seria mezoporowatych wanadosilikalitów. Prace te prowadzone były w ramach współpracy z prof. S. Dźwigajem z *Sorbonne Université* w Paryżu. Uzyskane wyniki wykazały, że warunkiem wysokiej aktywności opracowanych katalizatorów w reakcji epoksydacji propenu jest obecność izolowanych tetraedrycznych centrów wanadowych oraz odpowiednia struktura porowata nośnika umożliwiająca łatwą dostępność dla reagentów. Szczególnym osiągnięciem Habilitantki było otrzymanie katalizatorów odznaczających się wysoką wydajnością w reakcji utleniania propenu, poprzez zastosowanie trójwymiarowej szerokoporowatej matrycy zapewniającej zarówno dobrą dyspersję jonów wanadu na powierzchni nośnika, jak i znaczące ułatwienie dyfuzji reagentów i produktów. Eliminacja centrów kwasowych z powierzchni katalizatorów wanadowych za pomocą alkaliów skutkowało znaczącą poprawą selektywności do tlenku propylenu, jednakże kosztem dużego spadku aktywności, spowodowanego, jak to wykazała Habilitantka, powstawaniem wanadanów potasu. Kolejny kluczowy wątek badań poświęcony był bezpośredniemu utlenianiu propanu do tlenku propylenu na katalizatorach wanadowych osadzonych na mezoporowatej matrycy krzemionkowej o strukturze SBA-3, z zastosowaniem N₂O jako utleniacza. Istotnym mankamentem opracowanego układu był jednak szybki spadek jego aktywności. Dr Held wyjaśniła przyczyny tego zjawiska oraz zaproponowała ogólny schemat reakcji, wykazując, że proces utleniania propanu do tlenku propylenu zachodzi w dwóch etapach. Taka konstatacja rodzi pewną konfuzję, gdyż w podsumowaniu najważniejszych osiągnięć Habilitantka klasyfikuje tę reakcję jako jednoetapową.

Odnosnie uwag o charakterze ogólnym, można zatem stwierdzić, iż dr Held zrealizowała swoje główne zamierzenia badawcze i osiągnęła większość postawionych celów poznawczych w niełatwej tematyce. Habilitantka wyodrębniła elementy nowości naukowej, stanowiące podstawę habilitacji oraz przedstawiła ogólne usytuowanie swoich osiągnięć na tle obecnego stanu wiedzy. Podsumowując ocenę rozprawy habilitacyjnej stwierdzam, że wzbogaca ona wiedzę w zakresie katalitycznych reakcji selektywnego utleniania węglowodorów na katalizatorach tlenkowych i stanowi wystarczający w rozumieniu Ustawy wkład dr Agnieszki Held w rozwój tej dziedziny.

4. Ocena dorobku dydaktycznego i organizacyjnego

Dr Agnieszka Held w trakcie dotychczasowej kariery naukowej prowadziła głównie ćwiczenia rachunkowe i laboratoryjne zarówno w języku polskim, jak i angielskim. Dorobek ten wzbogaca jeden 15-god. wykład prowadzony w dwóch wersjach językowych. Habilitantka sprawowała opiekę nad 31 pracami magisterskimi i licencjackimi oraz 1 pracą doktorską. Przez wiele lat pełniła funkcję kierownika pracowni i uczestniczyła w uruchomieniu nowych pracowni z zakresu technologii chemicznej oraz brała udział w opracowaniu materiałów dydaktycznych do ćwiczeń laboratoryjnych z kilku przedmiotów. Do dorobku dydaktycznego Habilitantki można również zaliczyć pokazy i zajęcia popularyzujące naukę dla uczniów szkół średnich w ramach Szkoły Akademickiej, prowadzenie cyklicznych zajęć laboratoryjnych w ramach Nocy Naukowców i Poznańskiego Festiwalu Nauki i Sztuki na Wydziale Chemii UAM, a także zajęć laboratoryjnych dla uczniów liceów w ramach Klas Akademickich.

Habilitantka była ponadto opiekunem roku dla specjalności Chemia Biologiczna (2006-2009) oraz członkiem Komisji Rekrutacyjnej na Wydziale Chemii UAM (2006).

Działalność organizacyjna Habilitantki związana była głównie z jej dużą aktywnością na tym polu w Polskim Towarzystwie Zeolitym. Dr A. Held pełniła bowiem funkcje członka Komisji Rewizyjnej (2007-2009, oraz 2018- br), zastępcy przewodniczącego (2009-2012) oraz sekretarza i skarbnika (2012-2018) PTZ. Ponadto brała udział w organizacji XVII i XXI Forum Zeolitowego. Docenić można również współorganizację 14th *European Symposium on Fluorine Chemistry* w Poznaniu.


Biorąc pod uwagę powyższe fakty oraz pozostałe dane zawarte w przedstawionej do oceny dokumentacji, mogę stwierdzić, iż działalność dydaktyczna i organizacyjna dr Agnieszki Held jest znacząca, jej dorobek na tym polu wypełnia wymogi stawiane habilitantom.

5. Podsumowanie końcowe

Przedstawiony do oceny cykl publikacji habilitacyjnych wraz z autoreferatem świadczą, iż dr Agnieszka Held, adiunkt w Katedrze Technologii Chemicznej na Wydziale Chemii Uniwersytetu Adama Mickiewicza w Poznaniu, jest doświadczonym nauczycielem akademickim i uczonym posiadającym zadawalający i dostrzegalny w środowisku dorobek naukowy, mieszczący się w głównym nurcie badań w uprawianej przez Nią dziedzinie. Kandydatka potrafi skutecznie zdobywać finansowe środki na badania oraz posiada kompetencje, umożliwiające samodzielne prowadzenie zarówno pracy naukowej, jak i dydaktycznej.

Na podstawie całościowej pozytywnej (przy wszystkich wymienionych zastrzeżeniach) oceny rozprawy habilitacyjnej i dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego dr Agnieszki Held uważam, iż spełnione zostały warunki ustawowe stawiane Kandydatom na stopień naukowy doktora habilitowanego, wymienione w „Ustawie o stopniach i tytułach naukowych” (Dz. U. Nr 65, poz. 595 z późniejszymi zmianami). Wnoszę, zatem o dopuszczenie dr Agnieszki Held do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

Kraków, 27 czerwca 2019 r.


Prof. dr hab. Zbigniew Sojka