

Warszawa, 26.01.2024 r.

Prof. dr hab. Wojciech Grochala  
Laboratorium Technologii Nowych Materiałów Funkcjonalnych  
Centrum Nowych Technologii Uniwersytetu Warszawskiego  
Żwirki i Wigury 93, 02-089 Warszawa

### **Opinia o osiągnięciu naukowym oraz całokształcie dorobku naukowego pani dr. Anny Olejniczak**

Według przedłożonej mi dokumentacji związanej z wnioskiem Pani dr. Anny Olejniczak do Rady Dyscypliny Nauk Chemicznych UAM o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego w dziedzinie nauk chemicznych, badania aplikantki powiązanie z osiągnięciem przedstawianym do oceny dotyczą badań strukturalnych małych cząsteczek organicznych w funkcji zwiększonego ciśnienia zewnętrznego. Badania koncentrowały się na blisko dziesięciu rodzinach związków chemicznych. Dalekosiężnym celem badań było określenie warunków występowania różnych form polimorficznych (w tym form solwatowanych), opisanie oddziaływań obecnych w strukturach licząc na to, iż uda się zrozumieć czynniki stojące za trwałością struktur (lub jej brakiem) oraz przyczyny przemian fazowych.

Pani dr Olejniczak doktorat zrobiła w 2010 r.; promotorem był pan prof. Andrzej Katrusiak. Od tamtej pory pracowała ostatnich 14 lat na Wydziale Chemii UAM (obecnie jako adiunkt).

Wyniki badań opisane zostały w dziewięciu pracach oryginalnych. Pani dr Olejniczak występowała w nich zawsze jako pierwsza lub druga autorka, oraz jako autorka korespondencyjna (w trzech publikacjach jako jedyny autor w tej roli). Współautorem każdej z prac jest pan prof. Andrzej Katrusiak, niekwestionowany autorytet w dziedzinie

strukturalnych badań wysokociśnieniowych. Ponadto, wkład do wielu prac mieli pan dr hab. Marcin Podsiadło, prof. UAM oraz pani dr hab. Anna Katrusiak a także inne osoby. Badania opisane w pracach są w znacznej mierze wynikiem realizacji projektów prowadzonych przez prof. Katrusiaka ale także w jednym przypadku przez sama aplikantkę (grant Sonata). Dlatego zasadne jest postawienie pytania o faktyczną samodzielność naukową pani dr. Olejniczak. Wróć do tego zagadnienia nieco niżej.

Wyniki zostały opublikowane w porządnych czasopismach branżowych typowych dla dziedziny chemii strukturalnej i krystalografii (*Cryst Growth Design, IUCR, Acta Cryst B* oraz *CrystEngComm.*) o średnim IF ok. 4, choć w zasadzie w każdej pracy poza analizą struktur występuje też analiza przemian fazowych a czasami także właściwości fizykochemicznych (np. *CrystEngComm* czy *Acta Cryst B* z zasady nie publikują samych struktur). Brak jest niestety prac w prestiżowych czasopismach interdyscyplinarnych głównego nurtu. Baza danych Scopus (akces 27 stycznia 2027 r.) wymienia czterdzieści publikacji dr. Olejniczak (H=15), gromadzących łącznie ponad 550 cyt. obcych; brak jest prac znaczących (tzn. mających ponad 100 cyt. obcych) a najlepiej cytowana praca (z 2009 r.) ma 70 cyt. obcych. Cytowania nie znajdują się niestety na krzywej wznoszącej; zaznacza się stagnacja.

Przejdę do meritum sprawy, czyli do kwestii naukowych powiązanych z ocenianym osiągnięciem.

Głównym osiągnięciem habilitantki wydaje się być opisanie struktur, przemian fazowych oraz *de facto* reakcji chemicznych (solwatacji, desolvatacji) dla wielu zróżnicowanych układów w funkcji ciśnienia zewnętrznego i temperatury, a także w wielu przypadkach z użyciem bardzo różnych rozpuszczalników do krystalizacji. Samo zebranie tak bogatego zestawu danych (można by rzecz czterowymiarowych, bo w funkcji składu chemicznego, rozpuszczalnika, p oraz T) przy konieczności częstego powtarzania eksperymentów ciśnieniowych w celu

uzyskania jak najlepszej jakości monokryształów, musiało być niezwykle pracochłonne i wymagać wielkiej staranności, zaangażowania i dokładności. Zważmy przy tym, że dla jednego konkretnego zestawu parametrów  $p, T$  jest możliwe osiągnięcie takich warunków na drodze wielu ważnych ścieżek (np. izotermicznej lub z podwyższeniem i obniżeniem  $T$ , z kompresją lub silniejszą kompresją i następczą dekompresją, etc. etc.). Stwarza to wielkie pole do badań mających na celu skutecznie osiągnąć minimum termodynamiczne układu, lub przeciwnie, zamrożenie układu w strukturze metastabilnej, dzięki barierom kinetycznym. W konsekwencji istniejących alternatyw, jest to zatem, by tak rzec, stachanowska praca zegarmistrzowska. Autentycznie doceniam ten wielki wysiłek i zaangażowanie badaczki.

Dorobku składającego się na osiągnięcie naukowe nie uważam za przesadnie zwarty tematycznie. Można by skonstatować, że realnym zwornikiem badan są owe wymienione w tytule osiągnięcia „*małe cząsteczki organiczne o słabych oddziaływaniach międzycząsteczkowych*” lecz taka definicja jest na tyle szeroka, że de facto opisuje niemal całą chemię organiczną układów stricte molekularnych. Widać to również wyraźnie po spisie bardziej szczegółowych osiągnięć naukowych (str. 38-9 autoreferatu) gdzie badaczka wyszczególnia osiągnięcia powiązane z każdą z publikacji z osobna. Dla takiego jak tu przedstawiony zbioru różnych rodzin cząsteczek chemicznych trudno jest, istotnie, znaleźć dużo wspólnych mianowników i wysunąć bardziej ogólne (a zatem z punktu widzenia nauki – ważniejsze) wnioski. Charakterystyczny jest również brak choćby jednej pracy przeglądowej w dorobku autorki (po 14 latach prowadzenia badań). Ta konkluzja recenzenta złagodzona jest faktem, iż w kilku przypadkach do badanej rodziny układów wchodzi więcej spowinowaconych ze sobą cząsteczek, przez co analityczna zaduma przynajmniej nad daną rodziną staje się możliwa (w ramach jednej publikacji). Za jedyny bezsprzecznie ogólny efekt działań można uznać „*zastosowanie wysokociśnieniowych metod do otrzymywania kryształów niemożliwych do uzyskania w warunkach normalnych*”; uczciwie jest jednak przyznać, że to znane jest nie od dziś. Można odnieść zatem wrażenie, że dopiero po

przeprowadzeniu badań postanowiono znaleźć dla nich jakiś wspólny mianownik. Jest to zatem podejście *curiosity-driven*; nie można go z gruntu potępiać bo to ciekawość jest fundamentem badań podstawowych, choć postępowanie *target-driven* jest mi bliższe i łatwiej jego zasadność wyjaśnić społeczeństwu, które badania finansuje. Powinienem w tym miejscu wyjaśnić, co uznałbym za wystarczająco ogólne. Przykładów można podać wiele, ale poprzestanę na jednym: przejścia fazowe między grupami centro- i niecentrosymetrycznymi. Te pierwsze są najbardziej typowe i jest ich najwięcej. Natura „lubi” środek inwersji, bo jego obecność minimalizuje silne (z reguły) oddziaływania dipolowe. Brak wypadkowego pola elektrycznego osłabia reaktywność układu w stosunku do świata zewnętrznego. Ferroelektryczność jest fascynująco rzadka i nie jest wiadome pod jak wysokim ciśnieniem zewnętrznym może występować. Autorka obserwuje pojawianie się faz pozbawionych środka inwersji (np.  $P2_12_12_1$  w pracy [H2] czy [H4]) ale nie czyni, moim zdaniem, wystarczająco pogłębionej refleksji nad pojawianiem się tych faz i ich relacją do faz centrosymetrycznych. Czyż nie jest fascynujące, że „prosty” dwunastoatomowy związek  $C_4H_2N_5Cl$  może tworzyć fazę niecentrosymetryczną o lepszym upakowaniu niż w formie centrosymetrycznej? Nie twierdze, że da się wyprowadzić prostą regułę kciuka, ale na pewno trzeba próbować. Tym bardziej cieszy mnie obserwowanie przed dr. Olejniczak odstępstw od znanych reguł (np. reguły przeciwstawnego wpływu ciśnienia i temperatury na strukturę). Tylko dzięki takim odstępstwom jesteśmy w stanie budować reguły o wyższym stopniu ogólności.

Czy istnieją wystarczająco ważne przesłanki do podjęcia tego typu badań, jakie opisane są w autoreferacie? Autorka nadmienia znaczenie badanych związków w farmacji i innych zastosowaniach. Zważmy jednak, iż związki organiczne stanowią podstawę znanego życia a *clue* ich funkcjonalności wynika właśnie ze sprytnie wykorzystanych słabych oddziaływań (tworzenie kompleksów prereaktywnych w centrach enzymów). Podejrzewa się nawet, że życie mogło powstać z małych cząsteczek właśnie w warunkach zwiększonego ciśnienia

zewnątrznego, w tzw. kominach wulkanicznych na dnie oceanów. Np., na dnie Rowu Mariańskiego panuje ciśnienie ok. 1 kbara; to używane przez aplikantkę obejmuje ten zakres i przekracza go ok. 10-krotnie (1 GPa). Są to ciśnienia adekwatne do badań cząsteczek organicznych, które przy wyższych ciśnieniach mogą rozkładać się lub wchodzić w niepożądane reakcje np. typu polimeryzacji. Słabe oddziaływania wymagają stosunkowo niewielkich ciśnień do studiów. Taki zakres ciśnień ma też taką zaletę, że jest niezłe skalowalny i autentycznie wykorzystywany w syntezie, co jest korzystne jeśli odkryje się jakąś ważną reakcję. Nawet jeśli rodziny badanych przez dr Olejniczak związków nie są silnie spokrewnione chemicznie, to samo zrozumienie zachowania i sekwencji ważności (dla stabilizacji struktury) różnych typów słabych oddziaływań jest niezwykle ważne.

Chciałbym wrócić do kwestii samodzielności habilitantki. Jej badania przedstawione w pracach [H1]-[H9] były znacznie rozciągnięte w czasie. Od obrony doktoratu upłynęło 14 lat, co jest dość długim okresem w karierze młodej badaczki. Mam silne wrażenie, że o ile aplikantka nie była samodzielna u początku tego okresu, np. gdy powstawała praca [H6] o tyle sytuacja istotnie się zmieniła pod koniec tego okresu, gdy zaczęła publikować prace jako autorka korespondencyjna. Oświadczenie współautorów o ich wkładzie również nie pozostawiają wątpliwości w tej kwestii. Wydaje się zatem, że przynajmniej w kilku pracach miała Ona kluczowy wkład w zaplanowanie badań zaś we wszystkich była kluczowym ich elementem sprawczym (wykonawczynią i analityczką danych). Moje wrażenie byłoby jednak dużo silniejsze, gdyby publikowała ona prace bez udziału tzw. *senior researchers* z jej zespołu badawczego, wykraczając także poza tematykę od lat uprawianą w tym zespole. Czas pokaże, czy jest do tego zdolna. Inaczej można być skazanym na świecenie światłem odbitym... Czas na budowę własnego zespołu np. dzięki projektowi SONATA BIS (do 12 lat po doktoracie) niestety już minął. Jednak nie wyklucza to ambitnych całkowicie samodzielnych działań i próby wejścia w nową tematykę badawczą.

Ocena dorobku naukowego dr. Olejniczak nie może abstrahować od innych elementów, nie będących bezpośrednią składową omówionego już osiągnięcia. Dr Olejniczak opublikowała kilkanaście wartościowych prac nie wchodzących do cyklu [H1-9]. Realizuje w nich podstawową misję krystalochemii, którą jest ustalanie struktur nowych związków, oraz struktur nowych odmian polimorficznych.

Ustnych wystąpień konferencyjnych jest kilka w tym, co cieszy, pięć na zaproszenie organizatorów; na tym etapie należałoby jednak zrezygnować z prezentacji posterów, pozostawiając to studentom. Dr Olejniczak czyni wysiłki w celu pozyskania środków na badania naukowe w formie grantów, zdobywanych w procedurach konkursowych choć nie są to starania intensywne (od otrzymania Sonaty upłynęło już sporo czasu). Nie mam zastrzeżeń co do kształcenia młodzieży; dr Olejniczak była promotorem pomocniczym w pięciu zakończonych sukcesem przewodach doktorskich.

W podsumowaniu, moja ocena dorobku dr. Olejniczak jest pozytywna. Za największą słabość Jej kariery uważam brak porządnego stażu podoktorskiego w którymś doskonałym ośrodku międzynarodowym; może to skutkować zasklepieniem się w określonej tematyce a z czasem uwiązaniem. Nauka istnieje tylko dzięki nowym pomysłom ludzkim, interakcjom i ekspozycji na nowe bodźce.

W podsumowaniu, uważam, że przedstawione osiągnięcia dr Olejniczak, mimo pewnych mankamentów, spełniają wymagania stawiane w Ustawie kandydatom na doktora habilitowanego i należy dopuścić aplikantkę do dalszych etapów postępowania.



Prof. Wojciech Grochala