

Prof. dr hab. Anna E. Kozioł

Lublin, dnia 10 lutego 2024 r.

## **RECENZJA**

### **osiągnięcia habilitacyjnego, dorobku naukowego, organizacyjnego i dydaktycznego dr Anny OLEJNICZAK w związku z postępowaniem o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne**

Podstawą wykonania niniejszej recenzji jest pismo Przewodniczącego Rady Naukowej Dyscypliny Nauki Chemiczne UAM prof. dr. hab. Macieja Kubickiego (uchwała Rady nr 26/2023/2024 z dnia 17.11. 2023 r.), informujące o fakcie powołania mnie do roli recenzenta w w/w sprawie.

#### **Ogólna ocena wniosku**

Dokumentacja, którą otrzymałam zawiera wniosek Habilitantki, autoreferat wraz z kopiami publikacji i oświadczeniami współautorów o ich udziale w tych pracach, a także informacje o innych osiągnięciach naukowych, w tym spis wszystkich publikacji i komunikatów prezentowanych na konferencjach naukowych. Podana jest ocena parametryczna dorobku naukowego. Głównym dokumentem jest autoreferat (42 strony) scalający i podsumowujący badania zawarte w 9 publikacjach, które są podstawą wniosku. Załączone są również dane charakteryzujące działalność badawczą w grantach, współpracę naukową, a także lista działań dydaktycznych i organizacyjnych.

#### **Ocena aktywności naukowej i dorobku naukowego**

Dr Anna Olejniczak uzyskała stopień magistra w roku 2005 na Wydziale Chemii Uniwersytetu Adama Mickiewicza w Poznaniu. Przez rok (2005 – 2006) była wykonawczynią w granicie uzyskanym z European Office of Aerospace Research and Development, natomiast w latach 2006 – 2012 była zatrudniona na etacie naukowo-technicznym w Zakładzie Chemii Materiałów Wydziału Chemii UAM.

Prace badawcze, zarówno w ramach pracy magisterskiej jak i doktorskiej, wykonywała pod kierunkiem prof. dr. hab. Andrzeja Katrusiaka jako promotora. Badania prowadzone przy kolejnych stopniach naukowych były kontynuacją i poszerzaniem wcześniejszych prac z zakresu analizy strukturalnej faz krystalicznych przy zmiennych warunkach fizycznych (ciśnienia i temperatury). Jej praca magisterska była zatytułowana „*Struktury zamrożonych ciśnieniowo kryształów 1,2-diaminoetanu oraz 1,3-diaminopropanu*”, natomiast praca doktorska – „*Polimorfizm i właściwości dielektryczne kryształów dabco-HA (HA = HI, HBr, HClO<sub>4</sub>)*”. Należy nadmienić, że badania opisane w rozprawie doktorskiej były wykonywane w ramach grantu promotorskiego MNiSzW.

Na podstawie wcześniej wymienionej rozprawy doktorskiej Habilitantka uzyskała stopień naukowy doktora nauk chemicznych w roku 2010. Po uzyskaniu stopnia doktora, od roku 2012, Habilitantka pracuje jako adiunkt w Zakładzie Chemii Materiałów Wydziału Chemii UAM.

Istotne jest to, że badania prowadzone przez Nią były i są wykonywane pod kierunkiem i we współpracy z prof. dr. hab. Andrzejem Katrusiakiem, który jest jednym z pionierów i autorytetów w dziedzinie badań materiałów w warunkach ekstremalnych, w tym badań dyfrakcyjnych monokryształów pod wysokimi ciśnieniami. Tematyka i przedmiot badań Habilitantki są zgodne z miejscem Jej zatrudnienia, czyli są to badania nowych materiałów, głównie kryształów molekularnych, w warunkach zmiennych ciśnień, temperatur, rozpuszczalników. Po opracowaniu metodyki krystalizacji i pomiarze dyfraktometrycznym, wykonywana jest analiza struktury tych faz i przejść fazowych. Analizowane były zmiany struktury cząsteczek i rodzaje oddziaływań międzycząsteczkowych – klasyczne i słabe wiązania wodorowe, halogenowe, elektrostatyczne – występujące w badanych kryształach oraz zmiany w topologii asocjacji cząsteczek w sieciach krystalicznych.

Dr Anna Olejniczak współpracuje również z pracownikami naukowymi z innych zespołów, między innymi z Wydziału Fizyki UAM, Wydziału Farmacji Uniwersytetu Medycznego w Poznaniu, z Wydziałów Chemii Uniwersytetu Opolskiego, Uniwersytetu Jagiellońskiego, Politechniki Warszawskiej. Część badań Habilitantka wykonywała wspólnie z ośrodkami zagranicznymi, m.in. z pracownikami uniwersytetów: University of Southern California (Los Angeles), Politechnico di Milano, Università di Bologna, Università di Torino, a także European Laboratory for Non-Linear Spectroscopy (Florencja), European Synchrotron Radiation Facility (Grenoble) oraz Latvian Institute of Organic Synthesis (Ryga).

Wyniki badań dr Anny Olejniczak, mających istotne znaczenie dla wiedzy o materiałach krystalicznych, zostały opublikowane w czasopismach uznawanych za wiodące w zakresie badań strukturalnych, m. in. w: *Crystal Growth & Design*, *CrystEngComm*, *Acta Crystallographica*, *Journal of Fluorine Chemistry*, *Journal of Physical Chemistry*, *New Journal of Chemistry*, *Journal of Molecular Structure*, *Chemistry – A European Journal*. Wszystkie wymienione czasopisma mają przypisany Impact Factor w bazie *Journal Citation Reports*.

Całkowita liczba publikacji dr Anny Olejniczak wynosi 40; liczba cytowań według bazy Scopus 620 (na dzień 30 stycznia 2024 r.) oraz Indeks Hirscha  $H = 15$ . Przy czym przed uzyskaniem stopnia doktora opublikowała 11 prac. Ponad to Jej udział w krajowych i międzynarodowych konferencjach naukowych zaowocował 15 komunikatami, z czego 5 było prezentowanych jako wykłady na zaproszenie.

Za swoje osiągnięcia badawcze (grupowe i indywidualne) była wielokrotnie wyróżniana nagrodami lub stypendiami m.in. Dziekana Wydziału Chemii, Rektora UAM czy ministra MniSzW.

### **Ocena osiągnięć naukowych zgłoszonych jako podstawa do przewodu habilitacyjnego**

Dr Anna Olejniczak przedstawia, jako podstawę wniosku o stopień, osiągnięcie naukowe zatytułowane „*Preferencje krystalizacji pod wpływem wysokiego ciśnienia związków organicznych o słabych oddziaływaniach międzycząsteczkowych i międzyjonowych*”.

Na ten dorobek habilitacyjny składa się dziewięć wybranych przez Nią prac publikowanych w latach 2011 – 2022. Prace są współautorskie, Habilitantka załączyła listę oświadczeń autorów. W siedmiu publikacjach dr Anna Olejniczak jest pierwszym autorem, przy czym w 4 autorem korespondencyjnym. Artykuły ukazały się w czasopismach: *Crystal Growth & Design*, *Cryst Eng Comm*, *Acta Crystallographica* oraz *IUCrJ*. Obliczony dla tych prac sumaryczny IF wynosi 37.452.

Wkład Habilitantki w powstanie większości publikacji polegał – cytuję: „na opracowaniu koncepcji, zaplanowaniu i wykonaniu większości prac eksperymentalnych, które objęły krystalizacje wysokociśnieniowe, pomiarach dyfraktometrycznych w warunkach normalnych oraz wysokociśnieniowych i temperaturowych; analizie oraz interpretacji otrzymanych danych, przygotowaniu i korekcie manuskryptu, przygotowaniu odpowiedzi na recenzje”. Współautorem wszystkich publikacji oraz autorem korespondencyjnym sześciu z nich jest prof. Andrzej

Katrusiak, który swój udział opisuje jako dyskusowanie otrzymanych wyników, konsultacje przy korekcie tekstu manuskryptu i odpowiedziach na recenzje. Natomiast pozostali współautorzy wykonywali syntezy niektórych badanych związków, niektóre krystalizacje i pomiary dyfrakcyjne rentgenowskie lub neutronowe oraz kalorymetryczne. Na tej podstawie należy stwierdzić, iż dr Anna Olejniczak jest wiodącą koordynatorką, wykonawczynią badań i interpretatorką wyników.

**Ocena merytoryczna.** Brak jasno sprecyzowanego celu badań przez Habilitantkę, to jest pierwsze wrażenie jakie odnosi się, czytając przygotowany przez Nią autoreferat. Cel rozprawy habilitacyjnej trzeba sobie samodzielnie wynajdywać w ogólnym wprowadzeniu do tematyki prac (strony 7 – 9) oraz we wprowadzeniu do trzech wydzielonych podgrup związków (str. 10 – 11, 25 i 29 – 30), ewentualnie w podsumowaniu (str. 37 – 39). Należy domniemywać, że Habilitantka planowała badania strukturalne wybranych kryształów molekularnych, w których występują słabe oddziaływania międzycząsteczkowe lub międzyjonowe, i które mogą być modyfikowane pod wpływem czynników fizycznych (ciśnienie i/lub temperatura) lub chemicznych (rozpuszczalniki). Potencjalnie stwarza to możliwość otrzymania nowych faz stałych, takich jak odmiany polimorficzne lub solwaty, a także wymuszenie przyjmowania przez cząsteczki nowych form tautometycznych lub mezomerycznych. Rozwiązanie takich zagadnień jak warunki otrzymania faz i przemian fazowych, trwałość faz itp., jest bardzo istotne w badaniach nowych materiałów.

Do swoich prac Habilitantka wykorzystała trzy grupy związków:

1. wysokoazotowe związki [1 – 6] zawierające kombinacje grup takich jak pirydazynowa, azydkowa, triazolowa czy tetrazolowa;
2. związki małowcząsteczkowe [7 – 10]: tiomocznik, chlorowe pochodne acetonitrylu oraz
3. sole organiczne [11 – 13]: chlorowodurek ksylazyny oraz nadchloran i tetrafluoroboran 1.4-diazabicyklo[2.2.2]oktanu.

Kryształy w warunkach wysokich ciśnień były otrzymywane w komorze z kowadełkami diamentowymi, a główną metodą badawczą była dyfrakcja promieni rentgenowskich na monokryształach, oraz pomocniczo – dyfrakcja na proszkach, dyfrakcja neutronów czy kalorymetria. Dr Anna Olejniczak wymienia w Tabelach 1, 2 i 3 otrzymane i zidentyfikowane przez Nią fazy, a na Rysunkach 2, 10 i 22 przedstawia przykładowe schematy przejść fazowych. Jak widać z tych danych, kryształy niektórych związków są szczególnie ‘plastyczne’, podatne na tworzenie nowych odmian polimorficznych, solwatów, w tym hydratów; należą do nich związki **3, 5, 6, 7, 11, 12** oraz **13**. Otrzymane fazy były analizowane przez Habilitantkę pod kątem zmian geometrii cząsteczek, objętości cząsteczek, parametrów komórek elementarnych, symetrii sieci krystalicznej, ułożenia cząsteczek w przestrzeni trójwymiarowej i sposobów ich asocjacji, obecności i roli cząsteczek rozpuszczalników. I te parametry były w kolejnym kroku korelowane ze zmianami parametrów fizycznych, w jakich wzrastały kryształy, a morfologia tworzących się kryształów była wnikliwie obserwowana i rejestrowana.

Podsumowując swoje wyniki prezentowane w publikacjach H1 – H9, Habilitantka wymieniła jako osiągnięcia:

- ⊃ zastosowanie wysokociśnieniowych metod do otrzymania kryształów, niemożliwych do uzyskania w warunkach normalnych, które są stabilne po powrocie do warunków otoczenia;
- ⊃ otrzymanie nieznanych dotąd niesolwatowanych i solwatowanych kryształów prawie wszystkich badanych związków i określenie ich struktur;
- ⊃ określenie warunków tworzenia i stabilności otrzymanych form (wpływu rodzaju podstawników w cząsteczkach, stosowanych rozpuszczalników i ich stężeń, oraz ciśnienia i temperatury);

- ▷ określenie roli i motywów wiązań wodorowych oraz ich znaczenia w upakowaniu cząsteczek w sieci krystalicznej, wyjaśnienie jaki wpływ na topologię wiązań wodorowych CH...N oraz oddziaływań N...N ma obecność grup metylowych w cząsteczkach pochodnych pirydazyny **1 – 6**;
- ▷ wyjaśnienie przyczyn różnego zachowania się związku **6** podczas zastosowania izotermicznej kompresji oraz wysokociśnieniowej rekrytalizacji;
- ▷ wyjaśnienie przyczyn powstawania hydratów tiomocznika (**7**) przy wysokim ciśnieniu oraz dehydratacji powyżej 1.20 GPa, określenie znaczenia oddziaływań międzycząsteczkowych w tych przemianach;
- ▷ określenie nieznanych dotąd struktur krystalicznych chlorowych pochodnych acetonitrylu (**8 – 10**); odkrycie, że w tej grupie związków nie zostaje spełniona reguła Carnelleya;
- ▷ wykazanie, że sole **11** i **12** charakteryzują się dużą liczbą polimorfów oraz izostrukturalnością w fazach polimorficznych I, II oraz III/IV;
- ▷ wykazanie, że powyżej 2 GPa sól **11** krystalizuje w formie solwatu z dwiema cząsteczkami metanolu, wykazującymi silne nieuporządkowanie, które pozostaje niezmiennione w wyższym ciśnieniu;
- ▷ otrzymanie stabilnych form krystalicznych solwatów **13** poprzez zastosowanie metod wysokociśnieniowych, co umożliwiło określenie ich struktur.

W sumie wyniki pomiarów dyfrakcyjnych i obliczeń wykorzystanych do opracowania powyższych wniosków są zdeponowane przez Habilitantkę w bazie danych strukturalnych CCDC jako 136 zbiorów CIF.

Zaprezentowane rezultaty wnoszą wiele istotnych nowych informacji do wiedzy o materiałach organicznych i ukazują Habilitantkę jako specjalistkę w tej dziedzinie.

### **Ocena działalności dydaktycznej, organizacyjnej i popularyzatorskiej**

Mając na uwadze fakt, że dr Anna Olejniczak jest zatrudniona od roku 2012 jako adiunkt, trzeba też ocenić Jej dorobek dydaktyczny. Jej macierzysty Zakład realizuje zajęcia dydaktyczne w ramach Zespołu Chemii Fizycznej, dlatego Habilitantka prowadzi głównie zajęcia dydaktyczne z przedmiotów 'podstawy chemii fizycznej' i 'chemia fizyczna'. Formy zajęć obejmują ćwiczenia laboratoryjne, proseminaria oraz ćwiczenia rachunkowe dla studentów I i II stopnia studiów. Wśród działalności na tym polu wymienia również laboratoria 'materials in extreme conditions' w języku angielskim dla studentów z programu AMU-PIE, a od obecnego roku akademickiego będzie wykładała przedmiot 'basic physical chemistry'. Natomiast w Zakładzie Chemii Materiałów ma możliwość działania w swojej tematyce badawczej i była opiekunką pracy licencjackiej, trzech magisterskich, a także – co jest bardzo istotne – promotorką pomocniczą pięciu prac doktorskich.

Dr Anna Olejniczak w latach 2008 – 2021 była zaangażowana w prace komitetu organizacyjnego corocznych międzynarodowych warsztatów "Frolic Goats High-Pressure Diffraction Workshop", które odbywały się na Wydziale Chemii UAM w Poznaniu i promowały stosowanie technik wysokociśnieniowych w krystalografii. Na tych warsztatach wygłaszała też wykłady instruktażowe oraz prowadziła część praktyczną. W roku 2017 pracowała również w Komitecie organizacyjnym cyklicznej 55. konferencji European High-Pressure Group Meeting (<https://ehprg2017.syskonf.pl/>), w której uczestniczyło ponad 250 osób.

### **Ocena innej działalności**

Bardzo znaczący jest udział dr Anny Olejniczak w grantach finansujących badania naukowe. W latach 2007 – 2010, przed uzyskaniem stopnia doktora, była wykonawczynią w 4 wieloletnich projektach finansowanych przez EOARD, MNiSzW oraz FNP. W późniejszy okresie (2010 – 2024) była wykonawczynią w 4 kolejnych grantach oraz kierownikiem projektu SONATA, finansowanego

przez NCN, zatytułowanego *"Badanie wpływu warunków ekstremalnych na równowagę azydotetrazolową w pochodnych pirymidyny oraz pirydazyny"*.

Habilitantka podaje, że przygotowała 11 recenzji artykułów nadesłanych do międzynarodowych czasopism naukowych z dziedziny badań strukturalnych.

Wyjazdy za granicę, zarówno krótko jak i długoterminowe, nie pojawiają się w wykazie działań dr Anny Olejniczak. Stąd brak jest informacji o tym, czy wykonywała Ona badania poza swoim stałym miejscem zatrudnienia, w laboratoriach krajowych lub zagranicznych, na stażach lub w ramach grantów. Czy wymieniona wcześniej współpraca była jedynie zdalna/korespondencyjna?

### Posumowanie opinii

Podsumowując ocenę osiągnięć dr Anny Olejniczak należy stwierdzić, że Jej prace badawcze, prowadzone w bardzo aktualnej tematyce syntezy i analizy nowych materiałów, są na bardzo wysokim poziomie. Obecnie w dorobku naukowym Habilitantki jest 40 publikacji i mają one dość dużą rozpoznawalność, uzyskując 629 cytowań. Do finansowania tych badań pozyskano w sumie 9 różnych grantów. Na uwagę zasługuje fakt prowadzenia przez Habilitantkę pracy dydaktycznej ze studentami na każdym etapie studiów chemicznych, czyli I i II stopień – przedmioty na poziomie podstawowym oraz na pracowniach dyplomowych, a także z doktorantami. W działalności organizacyjnej na rzecz nauki wyróżniają się prace w komitetach organizacyjnych 15 warsztatów z zastosowań wysokich ciśnień. Natomiast dużym mankamentem jest brak prowadzenia badań w innych laboratoriach niż macierzystego Wydziału. Niezbyt imponująca jest też liczba komunikatów konferencyjnych jak na 17 lat pracy Kandydatki na Wydziale Chemii UAM.

Dr Anna Olejniczak we wniosku o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne przedstawiła jako osiągnięcie cykl dziewięciu publikacji. Cykl ten zatytułowała *„Preferencje krystalizacji pod wpływem wysokiego ciśnienia związków organicznych o słabych oddziaływaniach międzycząsteczkowych i międzyjonowych”*. Artykuły włączone do tego cyklu są monotematyczne, spójne jeśli chodzi o metodykę (synteza kryształów w warunkach wysokich ciśnień, rentgenografia strukturalna) i badane grupy związków. Wszystkie prace są opublikowane w czasopismach o zasięgu międzynarodowym. Prace pod względem rzetelności metodyki badań i aktualnej wagi omawianych problemów należy ocenić jako innowacyjne i bardzo dobre. Ponadto prace te świadczą o umiejętności współpracy Habilitantki w zespołach badawczych oraz o przygotowaniu do samodzielnych badań. Oceniam, że zbiór prac i dokumentów przedstawiony mi do oceny spełnia podstawowe wymagania stawiane przez art. 219 ust. 1 pkt 2 i 3 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. - *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* (Dz. U. z 2021 r., poz. 478 z późn. zm.)

Rekomenduję, aby **dr Anna Olejniczak** była dopuszczona do dalszych etapów postępowania w procedurze o nadanie stopnia doktora habilitowanego w dyscyplinie nauki chemiczne.

/Anna E. Koziół/

