



**POLITECHNIKA
GDAŃSKA**

WYDZIAŁ CHEMICZNY

Prof. dr hab. inż. Jarosław Chojnacki,
Katedra Chemii Nieorganicznej,
Wydział Chemiczny PG

Gdańsk, 20.05.2025 r.

Ocena osiągnięcia naukowego p.t. „Zależności między składem, strukturą a właściwościami w materiałach krystalicznych: badania strukturalne kryształów wieloskładnikowych i materiałów metalo-organicznych typu gość-gospodarz” oraz aktywności naukowej i całokształtu dorobku dr Ewy Patyk-Kaźmierczak z Wydziału Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, zgłoszonego w ramach postępowania habilitacyjnego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne

Wstęp i ocena formalna

W związku powołaniem przez Radę Dyscypliny Naukowej Nauki Chemiczne UAM w dniu 28 marca 2025 komisji habilitacyjnej dla dr Ewy Patyk-Kaźmierczak i powierzeniem mi w tej komisji roli recenzenta, stwierdzam że 10 kwietnia otrzymałem do oceny komplet wymaganych dokumentów, w tym cykl publikacji powiązanych tematycznie, zgodny z Ustawą „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce” z dnia 20 lipca 2018 r.

Habilitantka Ewa Patyk-Kaźmierczak ścieżkę zawodowo-naukową rozpoczęła uzyskaniem stopnia licencjata (2010), potem magistra chemii (z wyróżnieniem *maxima cum laude*, 2012) na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu a następnie broniąc tamże w 2016 roku pracy doktorskiej pod tytułem „Pressure-induced Phase Transformations of Carbohydrates” w której rolę promotora pełnił prof. Andrzej Katrusiak. Po doktoracie została zatrudniona w Zakładzie Chemii Materiałów na Wydziale Chemii UAM na stanowisku adiunkta, gdzie pracuje do dziś. W latach 2017/2018 przebywała na rocznym stażu naukowym jako postdok na University of Limerick, Limerick, Irlandia.

Celem tej recenzji jest ocena osiągnięć naukowych (Art. 219 Ustawy), które powinny stanowić znaczny wkład w rozwój określonej dyscypliny naukowej. W przypadku gdy osiągnięcie naukowe opisane jest w cyklu artykułów wieloautorskich, należy oszacować indywidualny wkład Habilitantki. Ocenie podlega również wykazywanie przez Habilitantkę istotnej aktywności naukowej w kraju i na arenie międzynarodowej.

Przedmiotem dodatkowej analizy są również inne osiągnięcia, np. dorobek dydaktyczny, popularyzatorski oraz uzyskane nagrody. Poniżej opisałem szczegółowo stopień spełniania wymienionych kryteriów przez dr Ewę Patyk-Kaźmierczak.

Ocena osiągnięcia naukowego

Powiązanie wiedzy krystalograficznej z poszukiwaniem nowych materiałów jest jednym z podstawowych paradygmatów obecnej chemii i inżynierii materiałowej. Znajomość struktury na poziomie molekularnym oraz wiedza o upakowaniu cząsteczek lub nieskończonych polimerów w ciele stałym oraz znajomość oddziaływań międzycząsteczkowych mają kluczowe znaczenie dla wyjaśnienia relacji struktura – właściwości. Szczególną rolę w tego typu badaniach odgrywają kryształy wieloskładnikowe włączając w to wszelkiego rodzaju solваты, kokryształy, sole organiczne, czy szkieletowe hybrydy organiczno-nieorganiczne. Wymienione materiały znajdują wiele zastosowań: np. kokryształy są intensywnie badane jako nośniki wprowadzające substancję czynną farmakologicznie (API) do organizmu, zwiększając efektywność działania leku. Metallo-organiczne materiały typu gość-gospodarz oferują z kolei możliwość separacji związków podobnych chemicznie ale różniących się kształtem. Ważnym aspektem jest również otrzymywanie materiałów o zaplanowanych właściwościach fizycznych. Wiadomo, że istnieje zapotrzebowanie na materiały o ujemnej liniowej ściśliwości lub ujemnej liniowej rozszerzalności termicznej, choćby do konstrukcji wysokociśnieniowych czujników czy do projektowania układów wymagającej pracy w szerokim zakresie temperatur. Tematyka rozprawy habilitacyjnej jest więc ważna w rozwiązywaniu aktualnych zadań badawczych podejmowanych dla rozwoju społeczeństwa bazującego na wiedzy.

Przejdźmy teraz do szczegółowej oceny osiągnięcia naukowego, najpierw bibliometrycznej, potem merytorycznej.

W cyklu publikacji nie ma prac jednoautorskich, więc dokładnej analizie należy poddać oświadczenia współautorów. Prace H2 i H4 są dwuautorskie i powstały przy współpracy z mężem dr. Michałem Kaźmierczakiem, którego rola nie miała charakteru wiodącego, co oprócz oświadczenia współautora dodatkowo potwierdza fakt, że to Ona była autorem korespondencyjnym w obu pracach. Z oświadczeń współautorów pozostałych publikacji wynika, że Ewa Patyk-Kaźmierczak była inicjatorką badań i osobą odpowiedzialną za ich zaplanowanie i przeprowadzenie na odpowiednim poziomie, a dodatkowo w pięciu z nich występowała jako autor korespondujący z recenzentami. W pracach H5, H7 rolę autora korespondencyjnego przejął prof. M. Zaworotko z Irlandii, co jest naturalne w pracach o międzynarodowym składzie autorów, a w H8 prof. A. Katrusiak. Oświadczenia współautorów są zgodne z deklaracjami zamieszczonymi w pracach przez czasopisma na etapie publikowania poszczególnych artykułów. Możemy więc założyć, że cykl publikacji H1-H8 stanowi odzwierciedlenie osobistego potencjału naukowego Habilitantki.

Dodam, że Habilitantka załączyła oświadczenia współautorów nie tylko prac dotyczących cyklu, ale również (w osobnym katalogu) dla szeregu prac spoza cyklu, np. oświadczenie Kristine Krukler-Berzina co do pracy z 2016 roku w *Cryst Growth. Des.*

Prace naukowe opublikowane są w renomowanych czasopismach jak *Angewandte Chemie*, *Chemical Communications*, *Crystal Growth & Design*, *IUCrJ*, *Physical Chemistry*, *Chemical Physics*. Sumaryczny wskaźnik oddziaływania (Impact Factor) dla cyklu publikacji wynosi 38,75 co daje dobrą średnią 4,77 na pracę. Prace cyklu ukazały się w latach 2017-2025 i były cytowane do tej pory 129 razy (stan podany w materiałach na styczeń 2025). 16 kwietnia 2025 cytowania wg bazy Scopus wynosiły: [H1] 0, [H2] 1, [H3] 3, [H4] 7, [H5] 27, [H6] 3, [H7] 83, [H8] 22. W sumie 146 razy, a więc w ciągu 3 miesięcy przyrosły o 17, co świadczy o stałym zainteresowaniu środowiska naukowego pracami Habilitantki.

Dodam, że właściwie najlepiej cytowaną pracą (86 cytowań) jest praca współautorska z M. Zaworotką, spoza cyklu, „A dynamic and multi-responsive porous flexible metal–organic material”.

Warto również wspomnieć, że Habilitantka łączy talent naukowy z graficznym, jako że Jej ilustracje zostały wybrane na okładki w zeszytach czasopism Chemical Communications (raz) oraz Cryst. Growth & Design (dwukrotnie). Oczywiście wiąże się to również (a może przede wszystkim) z uznaniem wyników Jej badań za interesujące i zachęcające do lektury czasopisma.

Opis merytoryczny prac H1-H8:

Praca **[H1]** opisuje badania wysokociśnieniowe i niskotemperaturowe kokryształów 1,2-bis(4-pirydyno)etanu ETY z kwasem fumarowym FUM oraz jego nasyconym analogiem, kwasem bursztynowym, SUC. Oba rodzaje kokryształów zawierają połączone wiązaniem wodorowym, typu OH...N, łańcuchy cząsteczek dające trójwymiarową strukturę typu stojaka na wino. W obu kokryształach stwierdzono występowanie anomalii typu ujemnej ściśliwości liniowej (NLC) przy zmianie ciśnienia oraz w postaci ujemnej liniowej rozszerzalności termicznej (NTE) w odpowiedzi na zmiany temperatury. Tego typu materiały są pożądane w technice, np. w konstrukcji czujników pracujących w warunkach wysokiego ciśnienia, czy dla kompensacji rozszerzania się materiałów w wyższych temperaturach.

W pracy Habilitantka przedyskutowała wpływ i relację zmian struktury na powstawanie tych anomalii. Stwierdziła, że obecność nawet niewielkiej zawady sterycznej w cząsteczkach składowych kokryształu powoduje duże zmiany w badanych właściwościach fizycznych. Warto dodać, że zjawisko NLC i NTE było obserwowane znacznie częściej w kryształach nieorganicznych lub metaloorganicznych i prezentowane układy są nielicznymi znanymi w domenie substancji organicznych (metal free, environment friendly) a jednocześnie wartości efektu NLC są porównywalne z publikowanymi w literaturze dla heksacyjanokobaltanu(III) srebra $\text{Ag}_3[\text{Co}(\text{CN})_6]$ czy dicyjanozłocianu(I) cynku $\text{Zn}[\text{Au}(\text{CN})_2]$.

Praca **[H2]** skupia się na opisie NLC w przypadku kokryształu ETYFUM i prezentuje go jako dobry wzorzec dla przyszłych prac związanych z poszukiwaniem materiałów kokrysztalicznych, gdzie relacje między strukturą a właściwościami fizycznymi są dość dobrze zbadane.

Publikacja **[H3]** opisuje badania kokryształów złożonych z 4,4'-bipirydyny (BIPY) i kwasu malonowego (MA) w warunkach wysokiego ciśnienia mające na celu indukowanie przeniesienia protonu, a co za tym idzie, transformacji kokryształu w sól. W pracy stwierdzono, że ciśnienie ma wpływ na przeniesienie protonu z kwasu do zasady. Przy niższych ciśnieniach obserwowano przeniesienie jednego protonu a przy wyższych dwóch protonów (z każdej cząsteczki kwasu). Przeniesienie drugiego protonu powodowało również przemianę fazową. Autorzy zaproponowali modyfikację reguły empirycznej stosowanej przy projektowaniu kokryształów mówiącej, że dla różnicy kwasowości składników $\Delta\text{pK}_a > 2$ częściej obserwuje się powstawanie soli. Sformułowano empiryczny trend, że im wyższe ciśnienie stosujemy, to ta różnica ΔpK_a może być coraz niższa. Celem naukowym publikacji **[H4]** i **[H5]** było zrozumienie tendencji związków organicznych charakteryzujących się brakiem silnych donorów wiązań wodorowych do tworzenia hydratów oraz stabilności kryształów związków hydratowanych w warunkach wysokiego ciśnienia **[H4]**. Zagadnienia te w **[H5]** omówiono w kontekście wyników obliczeń kwantowo-chemicznych - analizy potencjału elektrostatycznego ESP i krajobrazu wiązań wodorowych przy użyciu Pełnych Map Oddziaływań generowanych przez program Mercury (z ang. Full Interaction Maps – FIMs). Obiektami badań były antybiotyk sulfametoksazol (składnik biseptolu) oraz jego hemihydrat **[H4]** oraz heterocyliczne zasady azotowe (zasady Schiffa i cząsteczki tripodalne) i ich hydraty **[H5]**. Okazało się że, wbrew panującemu pogładowi, związki zawierające zwiększoną ilość niewysyconych akceptorów wiązań wodorowych nie zawsze mają większą skłonność do tworzenia hydratów. Dodam, że jedna ze struktur została rozwiązana z danych uzyskanych w wyniku dyfrakcji proszkowej a nie monokrysztalicznej, co jest rzadko łączone w rutynowych pracach krytalograficznych a świadczy o szerokich kompetencjach autorów pracy.

Publikacje [H6], [H7] i [H8] opisują badanie wpływu rodzaju cząsteczek gościa na strukturę krystaliczną wybranych materiałów metalo-organicznych typu gość-gospodarz (sql-1-Co-NCS i γ -CD-MOF z adsorbentem obecnym w porach) oraz na ich zachowanie w warunkach zmiennej temperatury i ciśnienia. W badaniach wysokociśnieniowych tych materiałów istotną rolę może odgrywać ciecz hydrostatyczna (PTM pressure transferring medium) na co zwracano szczególną uwagę. Pierwszy z tych materiałów (sql-1-Co-NCS) wykazuje budowę warstwową o topologii sieci kwadratowej i jest znany z tworzenia licznych struktur typu gospodarz-gość. Selektywna wymiana cząsteczek gościa obecnych wewnątrz porów może następować przy zmianie składu otoczenia, temperatury lub ciśnienia.

W pracy [H6] opisywane jest zachowanie (sql-1-Co-NCS) zawierającego 4 cząsteczki orto-ksylenu na jednostkę strukturalną gospodarza, pod wpływem zmian ciśnienia (0,1 MPa do 1.2 GPa) i temperatury. Podwyższenie ciśnienia powodowało zmniejszenie odległości międzywarstwowej i wielostopniowe usuwanie gościa z kryształów, Obniżenie temperatury z pokojowej do 100K powodowało pewien spadek objętości komórki elementarnej, i zbliżenie warstw sieci sql, ale bez zmiany zawartości porów.

Praca [H7] zajmuje się analizą sorpcji węglowodorów aromatycznych przez (sql-1-Co-NCS) z frakcji C_8 . Stwierdzono użyteczność tego materiału w selektywnym wyodrębnianiu orto-ksylenu z mieszaniny zawierającej inne izomery ksylenu i etylobenzen oraz wskazano na możliwość zastosowania go w roli sorbenta.

W pracy [H8] badane są struktury krystaliczne zawierające cyklodekstryny a konkretnie γ -CD-MOF-1 ($C_{48}O_{40}H_{82} \cdot 2KOH$) z adsorbentem (metanol lub 2-propanol) obecnym w porach. Badana cyklodekstryna zawiera 8 reszt glukozowych, co umożliwia występowanie dozwolonych w kryształach 4-krotnych osi symetrii. W badaniach tych zaobserwowano rzadko spotykane zjawisko zwiększania się rozpuszczalności kryształów w cieczy po zwiększeniu ciśnienia. Otrzymano dwie fazy a i b, różniące się symetrią (grupy symetrii $I432$ i $R32$). Stabilniejszą okazała się faza regularna.

Wszystkie prace cechuje bardzo dogłębna analiza geometrii badanych faz krystalicznych oraz kompetentny i wyważony opis znalezionych zależności struktura – właściwości.

Aktywność naukowa, inne badania i działalność organizacyjno-dydaktyczna

Wypełniając obowiązki recenzenta, oprócz analizy dostarczonych materiałów, przeprowadziłem ocenę całości aktywności naukowo-publikacyjnej dr Ewy Patyk-Kaźmierczak przy użyciu serwisu Scopus. Przeszukanie bazy Scopus 16 kwietnia 2025 pokazuje, że Autorka opublikowała w sumie 32 prace, cytowane 616 razy, bez autocytowań 497 razy osiągając indeks Hirscha równy 14. Baza Scopus podaje, że 50% artykułów powstało w kooperacji z uczonymi spoza Polski. Świadczy to o dobrej współpracy międzynarodowej.

W dniu 16 kwietnia 2025 bazy dokonałem również przeszukania bazy CSD w celu znalezienia struktur zdeponowanych po 2010 roku i skojarzonych z nazwiskiem i imieniem Habilitantki. Stwierdziłem obecność aż 229 struktur, z tym, że wiele z nich stanowi wyznaczenie struktury tej samej substancji w różnych warunkach fizykochemicznych, np. dla różnych ciśnień czy temperatur, co oznacza, że badane było 59 układów różniących się składem chemicznym.

Habilitantka ma doświadczenie w kierowaniu projektami naukowymi. Pełniła funkcję kierownika w trzech zakończonych grantach NCN oraz jednym finansowanym przez MNiSzW a obecnie prowadzi projekt typu SONATA BIS. Dodatkowo, w jednym zakończonym projekcie, pełniła funkcję wykonawcy.

Działalność dydaktyczna i popularyzująca naukę. Aktywność Habilitantki dobrze wpisuje się we współczesne trendy nowoczesnej edukacji nastawionej na dopasowanie się do potrzeb studentów z pokolenia Z. Moją uwagę zwrócił wkład w tzw. grywalizację treści programowych i udział w zaproponowaniu gry planszowej do nauki krystalograficznych grup punktowych oraz diagramów projekcji stereograficznych o nazwie „That's the point (group)!” propagowaną przez międzynarodową unię krystalograficzną (IUCr), na który to projekt zdobyła (wraz z współautorem) dofinansowanie od IUCr.

Habilitantka była przez 6 lat członkiem komitetu organizacyjnego międzynarodowych warsztatów "Frolic Goats High-Pressure Diffraction Workshop", odbywających się na Wydziale Chemii UAM przed rokiem 2021.

Jeszcze przed uzyskaniem stopnia doktora trzykrotnie otrzymała nagrodę Rektora UAM za działalność organizacyjno-naukową, dwa stypendia (START od Fundacji na rzecz Nauki Polskiej oraz stypendium dla młodych badaczy od Kapituły Nagrody Naukowej Miasta Poznania) oraz dwukrotnie zdobyła pierwsze miejsce w konkursie organizowanym przez poznański oddział PAN na najlepszą oryginalną pracę twórczą, w której autorem wiodącym jest doktorant (za rok 2012 i 2015). Po uzyskaniu stopnia doktora dwukrotnie otrzymała nagrodę Rektora UAM za działalność organizacyjno-naukową (oraz dodatkowo dwa razy za działalność naukową).

Poniżej podaję listę pytań i zagadnień, które chciałbym przedyskutować w trakcie kolokwium habilitacyjnego:

1. Jak Habilitantka ocenia obecne możliwości teoretycznego przewidywania nowych struktur wykazujących ujemne liniowe współczynniki ściśliwości lub rozszerzalności termicznej?
2. Jakie można podać fizykochemiczne uzasadnienie wpływu zmiany ciśnienia na większą lub mniejszą rozpuszczalność ciał stałych w cieczach? Czy wg Pani istnieje tu analogia do zjawiska zmniejszania się rozpuszczalności ze wzrostem temperatury (np. gips)?
3. Skuteczność dydaktyczna grywalizacji w nauczaniu krystalografii (na podstawie doświadczeń z „That's the Point (group)!”).
4. W badaniach Habilitantki pojawia się wątek wpływu ciśnienia na przeniesienie protonu między cząsteczkami. Znane są inne przykłady wpływu ciśnienia na właściwości chemiczne związków chemicznych bądź pierwiastków. W jakich, innych niż chemia, obszarach nauk ścisłych i przyrodniczych widzi Pani zastosowanie wiedzy na temat tych efektów?

Uwagi końcowe, podsumowanie

Przedstawione mi do oceny osiągnięcie naukowe Dr Ewy Patyk-Kaźmierczak a także manuskrypt, publikacje oraz pozostałe materiały prezentują wysoki poziom naukowy i edytorski i w pełni uzasadniają wniosek o nadanie stopnia doktora habilitowanego. Uważam, że Habilitantka jest dojrzałą, samodzielną uczoną zasługującą na wnioskowany awans. Posiada znaczny i wartościowy dorobek naukowy, który przyczynił się do rozwoju teorii i praktyki badań nad wpływem ciśnienia na właściwości fizyczne oraz chemiczne kryształów wieloskładnikowych w tym materiałów metalo-organicznych typu gość-gospodarz. Szczególnie cenne moim zdaniem są badania wpływu ciśnienia na międzycząsteczkowe przeniesienie protonu oraz przykład ciśnieniowego wzrostu rozpuszczalności. Przedstawiony cykl publikacji jest powiązany tematycznie i stanowi spójne dzieło reprezentujące wysoki poziom. Habilitantka wykazuje znaczną aktywność naukową posiadając duży dorobek naukowy poza tym cyklem, a dodatkowo także prowadzi szeroką działalność dydaktyczną i

organizacyjną oraz popularyzującą naukę. Posiada również doświadczenie w prowadzeniu badań w ramach współpracy międzynarodowej. W związku z powyższym stwierdzam z pełnym przekonaniem, że Pani Dr Ewa Patyk-Kaźmierczak spełnia ustawowe (*Ustawa z dnia 20 lipca 2018 r. – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (tekst jednolity: Dz. U. z 2023 r. poz. 742 z późn. zm.)*) wymagania stawiane kandydatom podczas ubiegania się o stopień naukowy doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie – nauki chemiczne. Wnoszę o dopuszczenie Jej do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

Z wyrazami szacunku

prof. dr hab. inż. Jarosław Chojnacki