

Warszawa, 7 czerwca 2025

Prof. dr hab. Kinga Suwińska
Matematyczno-Przyrodniczy – Szkoła Nauk Ścisłych
Uniwersytet Kardynała Stefana Wyszyńskiego w Warszawie
ul. Kazimierza Wóycickiego 1/3
01-938 Warszawa
e-mail: k.suwinska@uksw.edu.pl

Ocena dorobku i osiągnięcia naukowego

*Zależności między składem, strukturą a właściwościami w materiałach krystalicznych:
badania strukturalne kryształów wieloskładnikowych i materiałów metalo-organicznych
typu gość-gospodarz*

zgłoszonego w ramach postępowania habilitacyjnego
w dziedzinie nauk chemicznych, w dyscyplinie chemia
przez panią dr Ewę Patyk-Kaźmierczak
z Wydziału Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

Pani dr Ewa Patyk-Kaźmierczak ukończyła studia licencjackie na kierunku chemia (specjalność: chemia kosmetyczna) na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, gdzie w roku 2010 w Zakładzie Krystalografii pod kierunkiem prof. Macieja Kubickiego wykonała pracę licencjacką pt. *Wpływ warunków pomiaru dyfrakcyjnego na jakość uzyskanych struktur krystalicznych prostych kwasów organicznych*. W tej samej jednostce naukowej pod kierunkiem prof. Andrzeja Katrusiaka wykonała 2012 roku pracę maderską zatytułowaną *Tajemnice odmian polimorficznych (+)-sacharozy: ciśnieniowa zależność ich struktur i oddziaływań*, której wyniki zostały następnie opublikowane w prestiżowym czasopiśmie *Angewandte Chemie Int. Ed.*, a w 2016 r. obroniła rozprawę doktorską pt. *Wysokociśnieniowe przemiany strukturalne kryształów węglowodanów* wykonaną pod kierunkiem tego samego promotora. Po uzyskania stopnia naukowego doktora, w roku 2017, pani Ewa Patyk-Kaźmierczak została zatrudniona na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu na stanowisku adiunkta, na którym to stanowisku pracuje do dzisiaj.

Ogólny dorobek naukowy pani dr Ewy Patyk-Kaźmierczak obejmuje 33 publikacje (24 po uzyskaniu stopnia naukowego doktora), z Listy Filadelfijskiej. Sumaryczny *Impact Factor* prac wynosi ok. 176. Wszystkie prace były cytowane 622 razy (575 bez autocytowań, wg *Scopus* w chwili pisania recenzji), indeks Hirscha wynosi 14. W 16 publikacjach jest pierwszym współautorem, w 6 autorem korespondencyjnym. Pani dr Ewa Patyk-Kaźmierczak prezentowała też wyniki swoich badań na kilkunastu międzynarodowych i krajowych konferencjach naukowych, na których wygłosiła 9 referatów ustnych (w tym jeden na zaproszenie) oraz 6 komunikatów posterowych.

Dr Ewa Patyk-Kaźmierczak realizowała badania naukowe w ramach czterech projektów badawczych, w dwóch jako wykonawca (jeszcze jako studentka i doktorantka) oraz w dwóch jako kierownik (jednego przed i jednego po uzyskaniu stopnia naukowego doktora). Habilitantka odbyła roczny staż naukowy w University of Limerick w grupie Crystal Engineering Research, Limerick (Irlandia), gdzie pracowała pod kierunkiem prof. Mike'a Zaworotko.

Dr Patyk-Kaźmierczak podnosiła też swoje kwalifikacje zawodowe. Odbyła też trzy krótkoterminowe szkolenia:

- *Training in low temperature and zone-melting crystallization* Wydział Chemii, Uniwersytet Ruhr-Bochum University (Bochum, Niemcy),
- Warsztaty CCDC (23.08.2015) towarzyszące konferencji 29th European Crystallographic Meeting (Rovinj, Chorwacja),
- Szkoła *Higher European Research Course for Users of Large Experimental Systems* (HERCULES), Uniwersytet im. Josepha Fouriera / Grenoble INP (Grenoble, Francja).

Na dorobek naukowy zgłoszony w ramach postępowania habilitacyjnego składa się cykl 8 oryginalnych artykułów opublikowanych w *Crystal Growth & Design* (3 prace) *IUCrJ* (2 prace) oraz po jednej pracy w *Angewandte Chemie Int. Ed.*, *Chemical Communications* i *Physical Chemistry Chemical Physics*. Sumaryczny *Impact Factor* dla tych prac wynosi ok. 38, a liczba cytowań ok. 170 (w chwili pisanie recenzji).

Należy w tym miejscu zauważyć, że w sześciu zgłoszonych w ramach postępowania habilitacyjnego artykułach Habilitantka jest pierwszym autorem, a w pięciu autorem korespondencyjnym. Wszystkie prace są wieloautorskie. Uwagę zwraca praca [H7] opublikowana w *Angewandte Chemie Int. Ed.* (2019) **58**, 6630-6634 pt. *Selective High-capacity separation of o-xylene from C8-aromatics by a switching adsorbent layered material*, która aktualnie jest cytowana 93 razy.

Dr Ewa Patyk-Kaźmierczak była recenzentem kilkunastu artykułów dla czasopism z Listy Filadelfijskiej.

Ocena osiągnięcia naukowego

Jednym z głównych zagadnień, jakimi zajmuje się chemia supramolekularna, jest inżynieria krystaliczna i projektowanie oraz badanie właściwości fizycznych i chemicznych nowych układów wieloskładnikowych, takich jak kokryształy, solwaty czy związki inkluzyjne. Układy wieloskładnikowe, ze względu na inne oddziaływania międzycząsteczkowe, jakie w nich występują, wykazują inne właściwości fizykochemiczne (a także biologiczne w przypadku, gdy składnik/składniki tworzące układ wykazują aktywność biologiczną) i badanie tego typu układów pozwala poszerzyć wiedzę o oddziaływaniach międzycząsteczkowych, warunkach powstawania tych układów, ich stabilności i składu stechiometrycznego w różnych warunkach ciśnienia i temperatury, a także potencjalnych przejściach fazowych i istnieniu odmian polimorficznych.

Z kolei wykorzystanie supramolekularnych związków kompleksowych metali (SCC – ang. *supramolecular coordination complex*) i tworzenie przez nie polimerów koordynacyjnych, jest jednym z kierunków w inżynierii nowych materiałów. Termin *polimer koordynacyjny* jest

bardzo szerokim pojęciem i obejmuje dowolną rozbudowaną strukturę opartą na jonach metali połączonych w nieskończony łańcuch (1D), warstwę (2D) lub trójwymiarową architekturę (3D) poprzez ligandy mostkujące, będące zwykle ligandami organicznymi. Stosunkowo niedawno pojawił się w literaturze termin szkielet metaloorganiczny (MOF – ang. *metal organic framework*) – rodzaj polimeru koordynacyjnego, który jest trójwymiarowym, krystalicznym ciałem stałym i jest zarówno wytrzymałe, jak i porowate. Zarówno SCC-y, polimery koordynacyjne, jak i MOF-y mają wspólną konstrukcję węzłów metalowych połączonych ligandami organicznymi, a takie konstrukcje można ogólnie określić jako materiały metaloorganiczne (MOM – ang. *metal organic material*).

Ogólnie rzecz biorąc, cała dziedzina chemii polimerów koordynacyjnych jest obecnie niezwykle interesująca, głównie ze względu na ogromną różnorodność (a zatem możliwość dopasowania) i zakres projektowania nowych materiałów, które są hybrydami między metalami i/lub klastrami metali i ligandami organicznymi. Można śmiało powiedzieć, że zakres zastosowania MOM-ów w rozdzielaniu i magazynowaniu gazów, w szczególności jako materiałów do magazynowania wodoru, jest jedną z głównych sił napędowych obecnych badań naukowych w tej dziedzinie. Istnieje jednak wiele innych zastosowań i obszarów zainteresowania w chemii polimerów koordynacyjnych. Należą do nich, m.in. magnetyzm i przejścia spinowe, nieliniowa aktywność optyczna, kataliza i ujemna rozszerzalność cieplna.

Badania naukowe pani dr Ewy Patyk-Kaźmierczak dotyczą opisanych powyżej trendów w badaniach naukowych. Cykl prac, które Habilitantka składa, jako osiągnięcia naukowe, a które mają być podstawą do oceny w przewodzie habilitacyjnym, składa się z ośmiu artykułów naukowych. Motywem przewodnim tych prac są badania strukturalne metodami rentgenowskimi kryształów wieloskładnikowych w różnych warunkach ciśnienia i temperatury, a następnie analiza zmian parametrów komórki elementarnej, odległości międzycząsteczkowych w kryształach oraz innych wybranych parametrów, jak objętość luk w strukturze. Taka analiza służy Habilitantce do powiązania zmian parametrów strukturalnych zachodzących na poziomie molekularnym z właściwościami makroskopowymi badanych materiałów, takimi jak, np. ściśliwość liniowa i rozszerzalność cieplna czy wypełnienie materiału porowatego cząsteczkami gościa.

Habilitantka określiła, że jej celem było zbadanie wybranych kryształów wieloskładnikowych (kokryształów, hydratów i MOM-ów) w zależności od temperatury i ciśnienia, aby wytłumaczyć zależność między ich budową, w szczególności oddziaływaniami międzycząsteczkowymi a procesem krystalizacji i właściwościami kryształów. W szczególności badania te dotyczyły:

- badania stabilności i zachowania wybranych kryształów wieloskładnikowych oraz MOM-ów typu gość-gospodarz w różnych warunkach temperatury i ciśnienia
- wyznaczenia zależności między ΔpK_a koformerów tworzących kokryształy typu kwaszasada Brønsteda-Lowry’ego a ciśnieniem inicjującym przeniesienie protonu i przemianę kokryształu organicznego w sól organiczną,
- określenia zależności między podatnością związków o podobnej strukturze do tworzenia hydratów a ich cechami strukturalnymi,
- ustalenia wpływu struktury i charakteru chemicznego cząsteczki gościa na strukturę krystaliczną i zachowanie wybranych MOM-ów typu gość-gospodarz.

Do realizacji postawionego celu Habilitantka wykonała serie pomiarów dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego na monokryształach badanych substancji. Pomiary prowadzone były z wykorzystaniem komercyjnie dostępnych dyfraktometrów rentgenowskich (w kilku przypadkach także z wykorzystaniem promieniowania synchrotronowego) wyposażonych w odpowiednie oprogramowanie służące do zbierania i redukcji danych oraz rozwiązania i uściślenia otrzymanych modeli struktury kryształu. Do pomiarów w temperaturach innych niż pokojowa oraz w wysokich ciśnieniach Habilitantka wykorzystywała również komercyjnie dostępne, odpowiednio, przystawkę niskotemperaturową oraz komory z kowadełkami diamentowymi.

W analizach uzyskanych wyników badań strukturalnych Habilitantka wykorzystwała również dane strukturalne zdeponowane w bazie danych CSD znajdującą się w Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC). Korzystała także z oprogramowania, w które wyposażona jest baza CSD, pozwalającego na pogłębioną analizę i wizualizację danych strukturalnych.

W pracy [H1] i [H2] Habilitantka opisała badania wysokociśnieniowe i niskotemperaturowe dwóch izostrukturalnych kokryształów tworzonych przez 1,2-bis(4-pirydylo)etanu z (1) kwasem fumarowym i z (2) kwasem bursztynowym. Badane kokryształy wykazują ujemną ściśliwość liniową (NLC – ang. *negative linear compressibility*) gdy są poddane działaniu wysokiego ciśnienia oraz ujemna rozszerzalność cieplna (NTE – ang. *negative thermal expansion*), przy czym zjawiska te są znacznie większe w kokryształach z kwasem fumarowym w porównaniu z kokryształem z kwasem bursztynowym. Powstawanie tych zjawisk Autorka tłumaczy analizując zmiany w odległościach międzycząsteczkowych w badanych kryształach, a różnice w wielkości tych efektów, różnicą w budowie kwasu fumarowego i kwasu bursztynowego, która polega na obecności w pierwszym z nich centralnego wiązania podwójnego, a w drugim pojedynczego.

W pracy [H3] pani dr Ewa Patyk-Kaźmierczak opisuje badania kokryształów zbudowanych z 4,4'-bipirydyny i kwasu malonowego. Celem pracy było zastosowanie wysokiego ciśnienia do indukowania przeniesienia protonu pomiędzy składnikami kryształu, z których jeden jest potencjalnym donorem, a drugi posiada atomy z wolnymi parami elektronowymi i może być akceptorem protonu(ów). W wyniku zastosowania wysokiego ciśnienia dochodzi do transformacji kokryształu w sól. Badania strukturalne wykazały przejście fazowe przy ciśnieniu 3.1 GPa, któremu towarzyszyło obniżenie symetrii kryształu z grupy przestrzennej z $C2/c$ do $P2_1/c$ i przeniesienie dwóch protonów z cząsteczki kwasu malonowego na cząsteczkę 4,4'-bipirydyny, w wyniku czego powstała sól organiczna o wzorze ogólnym $K^{2+}A^{2-}$, gdzie K i A oznaczają odpowiednio organiczny kation i anion. Natomiast przy dekompresji podwyższenie symetrii kryształu z grupy przestrzennej z $P2_1/c$ do $C2/c$ zachodzi przy ciśnieniu 2.4 GPa, a szczegółowe badania strukturalne wykazały, że w czasie dekompresji dochodzi do stopniowego przeniesienia protonów od $K^{2+}A^{2-}$ poprzez K^+A^- do powrotu do kokryształu zbudowanego z obojętnych cząsteczek. Podobnie jak w poprzednich pracach, Autorka wyjaśnia zachodzące zjawiska szczegółowo analizując zmiany parametrów sieci kryształu i wybranych odległości międzycząsteczkowych w zależności od przyłożonego ciśnienia. Wnioski zostały również podparte obliczeniami DFT.

Z kolei w pracy [H4] i [H5] dotyczą badania wpływu ciśnienia na tendencję do tworzenia hydratów przez związki organiczne nieposiadające atomów zdolnych do tworzenia silnych wiązań wodorowych oraz wpływu obecności wody na stabilność kryształów. W tym przypadku do analizy danych strukturalnych pani dr Ewa Patyk-Kaźmierczak wykorzystwała funkcję umożliwiającą obliczanie pełnych map oddziaływań międzycząsteczkowych (FIM – ang. *full interaction maps*), jaką oferuje program MERCURY z pakietu CSD.

Ta technika obliczeniowa została zastosowana w pracy [H4] do analizy kryształów bezwodnych i hemihydratu sulfametoksazolu, będącego antybiotykiem bakteriostatycznym. Obydwa związki zostały poddane badaniom ciśnieniowym w temperaturze pokojowej, wykonano 13 pomiarów dla formy bezwodnej sulfametoksazolu w zakresie ciśnień 0.1–4.05 GPa oraz 21 pomiarów hemihydratu tego związku w zakresie ciśnień 0.14–4.09 GPa. Analiza zmian strukturalnych (parametrów sieci, objętości komórki elementarnej oraz gęstości kryształów) w połączeniu z analizą FIM doprowadziła habilitantkę do następującego wniosku. Woda w strukturze może wpływać na jej trwałość zarówno stabilizująco, jak i destabilizująco. Wynika to z większej liczby klasycznych wiązań wodorowych w strukturze hydratu w porównaniu z formą bezwodną, z drugiej strony gęstość kryształu maleje, a to obniża jego stabilność na kompresję.

Do badań przedstawionych w pracy [H5] Habilitantka wybrała jedenaście związków organicznych z grupy heteropierścieniowych związków aromatycznych, w których heteroatomem był atom azotu. Większość z tych związków była już raportowana w bazie CSD, bądź to w formie czystych związków, bądź hydratów, albo i jednych, i drugich. Badane związki Autorka podzieliła na trzy grupy: (1) takie, które krystalizują zarówno w formie czystej, jak i w formie hydratów, (2) związki, które nie tworzą hydratów pomimo prób ich otrzymania, (3) związki, które krystalizują tylko jako hydraty inie można dla nich uzyskać kryształów bezwodnych. Szczegółową analizę FIM Autorka przeprowadziła dla związków z grupy (1), tj dla bis(pirydyn-4-ylometyleno)benzeno-1,4-diaminy oraz jej monohydratu i tetrahydratu oraz dla N,N'-4-(1H-imidazol-1-yl)-N-(pirydyn-4-ylometyleno)aniliny i jej nonohydratu. Przeprowadzone przez habilitantkę badania sugerują, że analiza FIM może być pożytecznym narzędziem nie tylko do badania i przewidywania istnienia odmian polimorficznych kryształów, ale także może służyć przewidywaniu, czy dana substancja może krystalizować tylko, jako substancja czysta, jako hydrat lub obie formy są możliwe do otrzymania w zależności od warunków krystalizacji.

W publikacji [H6] Autorka omawia efekty strukturalne wywołane ciśnieniem w sieci o topologii kwadratowej warstwowego polimeru koordynacyjnego $[\text{Co}(\text{bipy})_2(\text{NCS})_2]_n$ (oznaczanego jako sql-1-Co-NCS), w którym cząsteczkami gościa jest *o*-ksylen – izomer ksyleny, który jest selektywnie absorbowany przez ten MOM. Analiza strukturalna układu sql-1-Co-NCS–*o*-ksylen (o stechiometrii gospodarz:gość 1:4) prowadzona była w zakresie ciśnień 0.1 MPa–1 GPa. Struktura krystaliczna sql-1-Co-NCS z *o*-ksylenem w temperaturze pokojowej różni się od opublikowanej wcześniej struktury wyznaczonej w temperaturze 100 K, co oznacza istnienie dwóch polimorfów tego związku oznaczonych przez Autorkę jako faza I i faza II. Natomiast podobnej przemiany fazowej Habilitantka nie obserwuje w przypadku badań w wysokich ciśnieniach, za to obserwuje stopniową desorpcję cząsteczek gościa z MOM poprzez wytworzenie dwóch faz pośrednich Ia i Ib, które różnią się stopniem

wypełnienia. Na podstawie analizy zmian parametrów sieci, jak i zmian geometrii polimeru koordynacyjnego zachodzących w strukturze, dr Ewa Patyk-Kaźmierczak tłumaczy zachowanie badanego kokryształu w warunkach zmiennej temperatury i zmiennego ciśnienia, i postuluje dwa różne mechanizmy zmian strukturalnych zachodzących w zależności od tego, który z czynników zewnętrznych je wywołuje.

Z kolei publikacji [H7] Autorka omawia wpływ rodzaju cząsteczek gościa na strukturę krystaliczną warstwowego polimeru koordynacyjnego $[\text{Co}(\text{bipy})_2(\text{NCS})_2]_n$ (sql-1-Co-NCS). Cząsteczkami gościa były izomery ksylenów oraz etylobenzen. Z badań sorpcji wynika, że krystaliczny sql-1-Co-NCS wykazuje największe powinowactwo do *o*-ksylenu, a najmniejsze do etylobenzenu, i to zarówno, gdy sorpcja zachodzi z fazy gazowej, jak i ciekłej, przy czym ilość zaabsorbowanego etylobenzenu jest dwukrotnie mniejsza, niż ilości ksylenów. Podobnie, stechiometria otrzymanych kryształów sql-1-Co-NCS·gość, gdy gościem jest ksylen (niezależnie od tego, który izomer) wynosi 1:4, natomiast, gdy gościem jest etylobenzen stechiometria wynosi 1:2. W tej pracy, podobnie jak w poprzednich, Habilitantka analizuje subtelne różnice geometrii cząsteczek, ich wzajemnego ułożenia i oddziaływania międzycząsteczkowe oraz zmiany strukturalne do wyjaśnienia zachodzących zjawisk, w tym przemian fazowych w przypadku klatratów z *o*- i *m*-ksylenem.

W pracy [H8] dr Ewa Patyk-Kaźmierczak opisała bardzo ciekawy MOF, w którym centrami metalicznymi są kationy potasu, a organicznymi ligandami są cząsteczki γ -cykloodekstryny (γ -CD), które są dość sztywnymi cząsteczkami makrocyclicznymi. W wyniku kompleksowania kationów potasu przez γ -CD powstaje porowata struktura, do której może łatwo zachodzić sorpcja cząsteczek gościa (gości) obecnych w środowisku krystalizacji. Habilitantka badała klatraty krystalizowane z dwóch układów: metanol-woda i izopropanol-woda. Otrzymane klatraty krystalizowały w układach: regularnym (faza α), w przypadku krystalizacji w obecności metanolu i romboedrycznym (faza β), gdy do krystalizacji użyty był izopropanol (w obu przypadkach stosowano technikę dyfuzji par rozpuszczalnika do wodnego roztworu zawierającego mieszaninę γ -CD i wodorotlenku potasu)). Co ciekawe, w obu fazach objętość wolna (kanałów 3D) jest praktycznie taka sama i wynosi 48.3 i 47.1% objętości komórki elementarnej (w temperaturze pokojowej i pod ciśnieniem atmosferycznym), odpowiednio dla faz α i β . Fazy te są stabilne podczas chłodzenia do temperatury ok. 200 K. Badania wykazały, że faza β samorzutnie przechodzi w fazę α po upływie ok. dwóch tygodni, a poddana następnie chłodzeniu ulega przemianie powrotnej do fazy β w temperaturze 245 K.

W wysokich ciśnieniach fazą preferowaną badanego MOF-u jest faza α . Kryształy γ -CD-MOF pod wpływem ciśnienia rozpuszczaniu, a proces ten jest procesem odwracalnym. Habilitantka tłumaczy ten odwrócony trend rozpuszczalności „wyższą gęstością układu osiągniętą dzięki wysokiemu stopniowi solwatacji izolowanych cząsteczek γ -CD”, a zdolność do łatwej resyntezy „cykliczną strukturą cząsteczek γ -CD, które pełnią rolę elementów budulcowych porowatych kanałów w γ -CD-MOF”. Takie tłumaczenie nie do końca jest przekonujące, ponieważ nie została przeprowadzona analiza składu kryształów i, w związku z tym, nie jest znana stechiometria woda:metanol/izopropanol w kryształach. Wiadomo, że γ -cykloodekstryna z wody krystalizuje z ok. 14 cząsteczkami rozpuszczalnika, z czego ok. 7 cząsteczek, to „wysokoenergetyczne” cząsteczki zainkludowane wewnątrz luki makrocyclicznej. Mam nadzieję na szerszą dyskusję na ten temat w czasie kolokwium habilitacyjnego.

Inne badania

Pani dr Ewa Patyk-Kaźmierczak, oprócz ośmiu wyżej omówionych publikacji, współautorką 25 innych artykułów naukowych, z których 16 powstało po uzyskaniu przez nią stopnia naukowego doktora. Wszystkie dotyczyły badań strukturalnych, trzy prace to prace teoretyczne dotyczące analizy danych strukturalnych pobranych z Cambridge Structural Database, pozostałe to prace doświadczalne. Sześć prac dotyczy badań MOM-sów, a trzy prace dotyczą zastosowania wysokich ciśnień w badaniach strukturalnych. Wszystkie prace zostały opublikowane w prestiżowych czasopismach naukowych z Listy Filadelfijskiej (punktacja MNiSW od 70 do 200).

Ocena działalności dydaktycznej i organizacyjnej

Pani dr Ewa Patyk-Kaźmierczak już jako doktorantka, a później jako adiunkt na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, była zaangażowana w działalność dydaktyczną. Prowadziła zajęcia (laboratoryjne, seminaria i ćwiczenia rachunkowe) ze studentami studiów I stopnia oraz studentami z wymiany międzynarodowej (Erasmus+ i SERP+), a od roku akademickiego 2023/2024 jest koordynatorem i wykładowcą przedmiotu Basic Physical Chemistry I dla studentów studiów międzynarodowych. W czasie obywatelstwa studiów doktoranckich sprawowała opiekę nad pracą magisterską wykonywaną w Zakładzie Chemii Materiałów, a będąc już adiunktem była promotorem pomocniczym jednej rozprawy doktorskiej oraz promotorem dwóch prac dyplomowych: licencjackiej i magisterskiej.

Za osiągnięcia w pracy naukowej pani dr Ewa Patyk-Kaźmierczak otrzymała kilka nagród i stypendiów. Była dwukrotnie laureatką I nagrody w konkursie Poznańskiego Oddziału Polskiej Akademii Nauk na najlepszą oryginalną pracę naukową napisaną przez doktoranta. W 2016 roku otrzymała stypendium dla młodych badaczy z poznańskiego środowiska naukowego oraz została laureatką stypendium START Fundacji na rzecz Nauki Polskiej. W latach 2020–2022 został jej przyznany dodatek za wysoką produktywność w działalności naukowej. Za osiągnięcia naukowe otrzymała też Indywidualną Nagrodę I stopnia Rektora Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza oraz czterokrotnie była laureatem Nagrody Zespołowej Rektora Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza za osiągnięcia naukowe i organizacyjne.

Pani dr Ewa Patyk-Kaźmierczak od roku 2014 jest członkiem Komitetu Organizacyjnego warsztatów naukowych pn. *Frolic Goats High-Pressure Workshop*, które odbywają się corocznie w Poznaniu, a w roku 2021 była przewodniczącą tego Komitetu.

W ramach prac organizacyjnych na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu dr Patyk-Kaźmierczak jest opiekunem kierunku Chemia Materiałowa (studia II stopnia), Członkiem Rady Naukowej Dyscypliny Nauki Chemiczne od roku 2020, Członkiem zespołu opracowującego program kształcenia dla kierunku Chemia Materiałowa (studia II stopnia). Była też zaangażowana w przygotowanie kart przedmiotów dla przedmiotów: Crystallography I – Elements, Crystallography II – Diffraction methods, Materials Diffractometry, Materials in extreme conditions, z oferty APU-PIE kierowanej do studentów programu Erasmus+ oraz dla przedmiotu Basic Physical Chemistry I (oferta studiów międzynarodowych I stopnia).

Pani dr Ewa Patyk-Kaźmierczak angażuje się też w działania popularyzujące naukę. Oprócz bycia jednym z organizatorów warsztatów naukowych *Frolic Goats High-Pressure*

Workshop, których celem jest popularyzacja wysokociśnieniowych technik dyfrakcyjnych, czynnie uczestniczyła w tych warsztatach prezentując wyniki swoich badań zarówno w formie wykładów ustnych, jak i w formie plakatów. Jest też współautorem gry planszowej „That’s the Point (Group)!” skierowanej do uczniów szkół licealnych, studentów, oraz wszystkich zainteresowanych, której celem jest wspomóc naukę tworzenia projekcji cyklograficznych grup punktowych i poznawanie elementów symetrii. Gra powstała w ramach CCDC Engagement Grant (na lata 2022-2023), przyznawanego przez Cambridge Crystallographic Data Center w celu opracowania materiałów promocyjnych popularyzujących krystalografię i badania strukturalne.

Podsumowując stwierdzam, że dorobek dydaktyczny i organizacyjny dr Ewy Patyk-Kaźmierczak spełnia wymagania stawiane w przewodach habilitacyjnych.

Uwagi końcowe

Przedstawiony mi do recenzji Autoreferat prezentuje ciekawe aspekty nowoczesnych badań z zakresu chemii strukturalnej kokryształów i metaloorganicznych materiałów porowatych. Badania dotyczące zjawisk zachodzących w kryształach wieloskładnikowych pod wpływem zmian temperatury i/lub w wysokich ciśnieniach wpisują się w nurt nowoczesnej inżynierii krystalicznej. W interpretacji wyników badań Autorka nie ogranicza się tylko do opisu statycznych struktur kryształów wieloskładnikowych, ale przedstawia te układy znacznie szerzej w odniesieniu do oddziaływań międzycząsteczkowych i próbuje, wywołane czynnikami zewnętrznymi zmiany parametrów sieci oraz geometrii wybranych parametrów cząsteczkowych, racjonalnie wyjaśnić możliwy mechanizm zachodzenia tych zmian. W swoich badaniach Habilitantka nie ogranicza się wyłącznie do rentgenografii strukturalnej (monokrystalicznej i proszkowej) prowadzonej w różnych warunkach, zwłaszcza do rentgenografii w wysokich ciśnieniach, co samo w sobie jest wymagającą techniką, ale korzysta też z danych dostarczanych przez inne techniki pomiarowe, jak spektroskopia Ramana, spektroskopia MNR, dynamiczna sorpcja pary (DVS – ang. *dynamic vapor sorption*), analiza termogravimetryczna (TGA) oraz z technik obliczeniowych, jak teoria funkcjonałów gęstości (DFT – ang. *density functional theory*) czy zaawansowane funkcje obliczeniowe, dostępne w programach obsługujących bazę danych strukturalnych (CSD). Dzięki temu możliwa jest poszerzona interpretacja danych strukturalnych.

W mojej opinii Habilitantka w pełni zrealizowała wszystkie sformułowane przez siebie cele i jest doświadczonym naukowcem o znaczącym i wartościowym dorobku naukowym. W związku z powyższym stwierdzam, że pani dr Ewa Patyk-Kaźmierczak spełnia wymagania ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2023 r. poz. 742) stawiane kandydatom podczas ubiegania się o stopień naukowy doktora habilitowanego i wnioskuję o dopuszczenie dr Patyk-Kaźmierczak do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego dla nadania Jej stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk chemicznych, w dyscyplinie chemia.

