

Wydział Chemii

Kierownik Zakładu Fizyki Chemicznej
Kierownik Zespołu Obrazowania Ramanowskiego
www2.chemia.uj.edu.pl/zor/



UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

Prof. dr hab. Małgorzata Barańska

ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków
tel. +48 12 686 2389
e-mail: baranska@chemia.uj.edu.pl

Jagiellońskie Centrum Rozwoju Leków

Kierownik Grupy Badawczej Spektroskopii Ramanowskiej
<http://www.jcet.eu/>

Kraków, 17 października 2019

OCENA

dorobku naukowego i rozprawy habilitacyjnej Pani Dr Grażyny Żukowskiej

Od solwatów do roztworów.

Wykorzystanie metod spektroskopowych do badań asocjacji jonowych w elektrolitach

Badania asocjacji jonowych w stałych i ciekłych elektrolitach dotowanych solami litowymi i sodowymi, w tym solami posiadającymi heter aromatyczne aniony o zdelokalizowanym ładunku

PODSTAWOWE DANE O HABILITANTCE

Pani Dr Grażyna Żukowska jest adiunktem na Wydziale Chemicznym Politechniki Warszawskiej. Stopień doktora chemii uzyskała w 2001 roku na tej samej uczelni broniąc pracę pt. *Nonaqueous proton conducting gel electrolytes*, a promotorem był Prof. dr hab. inż. Władysław Wieczorek.

Pani Doktor odbyła 2-letni staż podoktorski na Wydziale Fizyki University of Guelph (Ontario, Kanada) w okresie IX 2001-VII 2003, a wcześniej staż doktorancki (VII-VIII 1999) w City University of New York, Hunter Collage.

DZIAŁALNOŚĆ DYDAKTYCZNA I ORGANIZACYJNA

Pani Doktor od 2004 roku prowadzi zajęcia laboratoryjne w zakresie wykorzystania technik spektroskopii oscylacyjnej w ramach kilku kursów oraz zajęcia laboratoryjne z przedmiotu *Chemia Ogólna i Nieorganiczna*. Są to zajęcia w języku polskim i angielskim, dla studentów I i II stopnia). Prowadziła też wykład *Techniki Spektroskopowe*.

Pełniła funkcję promotora/opiekuna prac dyplomowych: 5 prac inżynierskich i 4 magisterskich. Jak dotąd nie pełniła opieki nad doktorantami w charakterze opiekuna naukowego lub promotora pomocniczego.

Pani Doktor współpracuje na arenie międzynarodowej, brała udział w 3 międzynarodowych sieciach badawczych (w latach 2004-2008, 2008-2011 i 2011-2015) jako wykonawca.

Uzyskała finansowanie dla 1 krajowego projektu z funduszy NCN, przy czym było to ponad 10 lat temu.

Pani Doktor jest ekspertem w dziedzinie spektroskopii oscylacyjnej i wykonała 13 zleceń w okresie 2007-2015 związanych m.in. z identyfikacją barwników, pigmentów, określeniem zawartości wody, analizą materiałów dentystycznych, próbek farmaceutycznych.

Nie zasiada w żadnym Komitecie redakcyjnym, nie jest członkiem towarzystw.

DOROBEK NAUKOWY

W latach 1996-2018 Pani Doktor opublikowała w sumie 96 publikacji z listy JCR (w 14tu z nich jest autorem korespondencyjnym), w tym 15 opublikowano przed doktoratem. Sumaryczny IF tych publikacji jest wynosi prawie 300. Liczba cytowań prac to 1525, a bez autocytowań to 1349, indeks h wynosi 21. Wszystkie te parametry scjentometryczne są na bardzo wysokim poziomie.

Habilitantka wygłosiła 6 referatów na międzynarodowych i krajowych konferencjach, kilkadziesiąt razy też aktywnie w nich uczestniczyła.

Prowadziła badania w ramach projektu *Badania asocjacji jonowych w stałych elektrolitach polimerowych do baterii z anodą litową*, finansowanego przez NCN, którego była kierownikiem w latach 2006-2008. Była też wykonawcą w kilku innych projektach NCN oraz jednym międzynarodowym.

Pani Doktor ma na swym koncie 4 zgłoszenia patentowe (1 w 1997, 3 kolejne w 2016).

Za swoją pracę naukową była kilkakrotnie nagradzana: Nagrodą Indywidualną - Stypendium Fiata za pracę doktorską w 2001 roku oraz Nagrodami Zespołowymi Rektora PWr (1999, 2000, 2010, 2012, 2018).

OSIĄGNIĘCIA HABILITACYJNE

Pani Doktor pracuje w dość dużym zespole naukowym, współpracuje w ramach wielu projektów, stąd Jej dorobek jest znaczący, bo na pewno łatwiej prowadzić badania w grupie o różnych ekspertyzach i publikującej wspólnie, ale stąd też potrzeba dokładnej analizy co należy do dorobku Habilitantki a co jest dorobkiem Jej współpracowników.

Tytuł osiągnięcia naukowego sformułowany na pierwszej stronie wniosku z dnia 5 listopada 2018 roku oraz na str.4, Zał.2 *Autoreferatu*, brzmi *Od solwatów do roztworów. Wykorzystanie metod spektroskopowych do badań asocjacji jonowych w elektrolitach*. Tak ogólne sformułowanie tytułu powoduje, że nie wiadomo co miałyby być osiągnięciem naukowym, bo przecież „metody spektroskopowe od wielu lat szeroko są stosowane w badaniach nad asocjacjami jonowymi” i robione jest to „rutynowo”, jak sama Habilitantka pisze na kolejnych stronach (str.7, Zał.2 *Autoreferatu*). Po zapoznaniu się jednak z *Autoreferatem* w całości oraz cyklem habilitacyjnym publikacji (H1-H14) doszłam do wniosku, że osiągnięcie Habilitantki wprawdzie związane jest z zastosowaniem metod spektroskopowych, ale dotyczy wybranych układów elektrolitycznych dotowanych solami i pozwala wyjaśnić mechanizmy wpływu dodatków w badanych układach, w tym tworzenia asocjatów. I tak sformułowany tytuł osiągnięcia naukowego znalazłam na str. 1 Zał. 4 *Autoreferatu*, tj. *Badania asocjacji jonowych w stałych i ciekłych elektrolitach dotowanych solami litowymi i sodowymi, w tym solami posiadającymi heter aromatyczne aniony o zdelokalizowanym ładunku*. Nasuwa się więc pytanie, dlaczego Habilitantka podała w dokumentacji dwa różne tytuły osiągnięcia naukowego?

Zgodnie z przesłaną dokumentacją na cykl habilitacyjny składa się 14 prac powiązanych tematycznie (H1-H14). Są to prace o dość wysokim współczynniku oddziaływania, większość ma IF pomiędzy 2,5 a 5, ale są też prace o IF ok. 7 (*J. Power Sources*) i ok. 10 (*Chem. Mat*). Tylko w pięciu publikacjach (H2, H4, H10, H11, H14) Habilitantka jest autorem korespondencyjnym, tylko w jednej (H14) jest pierwszym autorem. Z tym większą uwagą należy więc przeanalizować oświadczenia współautorów, tym bardziej, że udział Habilitantki określony został na poziomie 10-25% w dużej liczbie tych prac. Oświadczenia te jednoznacznie wskazują na rolę Pani Doktor we wspólnych badaniach. Była Ona odpowiedzialna za planowanie i prowadzenie badań z wykorzystaniem spektroskopii ramanowskiej i absorpcyjnej w podczerwieni, przy czym znacząca część opublikowanych wspólnie wyników to synteza związków, ich analiza krystalograficzna, pomiary elektrochemiczne, pomiary PXRD, pomiary NMR wykonywane przez pozostałych członków zespołu, w którym pracuje Pani Doktor.

Pani Doktor w pracach składających się na cykl habilitacyjny wykorzystwała techniki spektroskopii oscylacyjnej do badań zachodzących w elektrolitach polimerowych, a podstawowy cel jaki sobie postawiła to zbadanie agregacji w elektrolitach niewodnych. Pace te wpisują się w cykl badań realizowanych w zespole od lat, którego członkiem jest

Pani Doktor, dotyczących zastosowań elektrolitów niewodnych w układach elektrochromowych lub bateriach litowych i sodowych, dotowanych kwasami lub solami metali alkalicznych, niekiedy też zawierającymi napelniacze nieorganiczne i receptory anionów.

Pani Doktor zajmowała się badaniami asocjacji w elektrolitach niewodnych zawierających proste, dobrze scharakteryzowane sole, jak LiClO_4 czy LiCF_3SO_3 , w obecności różnego rodzaju receptorów anionów (H1-H3). Zauważyła, że kluczowe jest tworzenie kompleksów pomiędzy receptorem a rozpuszczalnikiem, konkurencyjne wobec oddziaływań receptor-anion. Zaproponowała sposób koordynacji w elektrolitach polimerowych, w fazie krystalicznej jak i amorficznej, wytłumaczyła mechanizm przewodnictwa w elektrolitach polimerowych zawierających sole o anionach Hückla (H8-H14).

Bardzo znaczące prace w kontekście ocenianego osiągnięcia habilitacyjnego wydają mi się H9 i H10, systematyzujące badania nad solami litowymi, od izolowanych jonów do zagregowanych przewodzących układów, w obu z nich Pani Doktor jest autorem korespondencyjnym. Choć kilka pasm ramanowskich zostało wybranych jako wskaźniki asocjacji jonowych to dokładna analiza oddziaływań jonowych prowadzących do powstania agregatów różnego typu wymagała badań na modelowych związkach-solvatach badanych soli z różnymi rozpuszczalnikami. Wyznaczenie ich struktury, typów koordynacji, pozwoliło na powiązanie tych danych ze zmianami na widmach ramanowskich.

Praca H4 z kolei, pokazuje jak sprawnie posługuje się Pani Doktor analizą spektroskopową, sięgając do metod analizy korelacyjnej 2D map synchronicznych dla modelowych układów elektrolitów polimerowych o różnych stosunkach molowych.

PODSUMOWANIE

Oceniając pozytywnie dorobek habilitacyjny recenzent powinien mieć przekonanie, że Habilitantka jest gotowa prowadzić samodzielnie pracę naukową. W szczególności, czy ma pomysły badawcze (najlepiej nowe, w odniesieniu do pracy doktorskiej czy odbytych staży), czy znajdują one zainteresowanie w świecie naukowym (czyli jak publikuje i jak odbierane są te prace), czy potrafi organizować sobie warsztat pracy (również poprzez zdobywanie funduszy na badania), czy umie pracować zarówno samodzielnie jak i w zespole, i czy ma potencjał do zbudowania swojej grupy badawczej oraz kierowania pracami doktorskimi?

Odpowiedzi pozytywne na te pytania nie trudno znaleźć czytając dokumentację habilitacyjną Pani Doktor Grażyny Żukowskiej, choć nie wszystko jest tak oczywiste. Dlaczego aktywność w zdobywaniu funduszy na badania jest dość skromna? Pani Doktor kierowała projektem NCN, ale było to ponad 10 lat temu, a w kolejnych latach „tylko” aktywnie uczestniczyła w projektach kierowanych przez innych członków zespołu. Wybór tematyki badawczej pokazuje pewną ewolucję naukową Pani Doktora i choć nie oderwała się od tematyki pracy doktorskiej to widać, że śledzi światowe trendy i ma też tam własny wkład. Odbyte staże zagraniczne z pewnością przyczyniły się do Jej szerszego spojrzenia na analizę spektroskopową i podjęcie wyzwania by robić to na wysokim poziomie.

Prace habilitacyjne Pani Doktor zostały opublikowane w czasopismach elektrochemicznych lub fizykochemicznych, a Jej wkład związany z analizą spektroskopową zawsze jest częścią tych publikacji. Z jednej strony pokazuje to wyraźnie jaki jest wkład Pani Doktor, ale kilkukrotnie jest to wkład na poziomie tylko 10%, z drugiej zabrakło mi tu pracy przeglądowej lub podsumowującej zastosowanie metod spektroskopowych w badaniach asocjacji/agregacji w elektrolitach niewodnych, lub większej liczby prac oryginalnych wyraźnie pokazujących potencjał metod spektroskopowych w tych badaniach. Ponadto, jak już opisałam powyżej, jest nieścisłość związana z tytułem osiągnięcia habilitacyjnego. Ostatnia drobna uwaga - nazwa spektroskopii absorpcyjnej w podczerwieni jest podawana zbyt skrótowo jako „spektroskopia w podczerwieni” lub „FTir” (z tym ostatnim skrótem jeszcze nigdy się nie spotkałam).

Podsumowując, Pani Dr Grażyna Żukowska przedstawiła w swoich publikacjach oryginalne wyniki. Ważkość jej badań dobrze ilustruje wysoki współczynnik oddziaływania prac, które opublikowała, jak również ich liczne cytowania. Osiągnięcie habilitacyjne Pani Żukowskiej jest znaczące. **Dorobek naukowy Dr Grażyny Żukowskiej spełnia wymagania ustawowe** (*Ustawa z dnia 14 marca 2003 O stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki Dz. U. nr 65, poz. 595 ze zmianami oraz Rozporządzenie Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 1 września 2011 w sprawie kryteriów oceny osiągnięć osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego oraz Rozporządzenie Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 19 stycznia 2018 w sprawie szczegółowego trybu i warunków przeprowadzenia czynności w przewodach doktorskich, w postępowaniu habilitacyjnym oraz w postępowaniu o nadanie tytułu profesora*) na stopień doktora habilitowanego, a jej prace składające się na cykl habilitacyjny charakteryzują się

oryginalnością. **Popieram wniosek o nadanie Jej stopnia doktora habilitowanego**, ale z uwagi na pewne nieścisłości w dokumentacji oraz sformułowane uwagi wnioskuję uprzejmie do Przewodniczącego Komisji Pana Prof. Andrzeja Sobkowiaka o zaproszenie Pani Doktor na posiedzenie komisji habilitacyjnej.

Y Barańska