

Poznań, dnia 01 lipca 2019 roku

Prof. dr hab. Marcin Hoffmann
Wydział Chemii
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
ul. Umultowska 89 b
61-614 Poznań
e-mail: mmh@amu.edu.pl
tel.: 515095827

OCENA

rozprawy habilitacyjnej (osiągnięcia naukowego) pt:
**„Na styku spektroskopii i krystalografii – badania fizykochemiczne
wybranych fotoaktywnych kompleksów koordynacyjnych”**
**oraz dorobku naukowo-badawczego, dydaktycznego, popularyzatorskiego
i organizacyjnego dr Katarzyny Jarzembkiej**

Doktor Katarzyna Natalia Jarzemska uzyskała stopień naukowy doktora nauk chemicznych w październiku 2012 roku. W marcu 2019 roku wystąpiła z wnioskiem o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk chemicznych: dyscyplina chemia. Otrzymana przeze mnie do recenzji dokumentacja przygotowana jest starannie, zgodnie z wymaganiami ustawowymi i zwyczajowymi, nie zawiera braków i nie wymaga uzupełnień. W mojej opinii umożliwia przeprowadzenie rzetelnej oceny kandydatury doktor Katarzyny Jarzembkiej do stopnia naukowego doktora habilitowanego. Osiągnięcie habilitacyjne ma formę cyklu dziewięciu publikacji powiązanych tematycznie. Wszystkie prace są efektem pracy grupowej jednak zgodnie z oświadczeniami współautorów wydzielone zagadnienia są indywidualnym wkładem osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego.

OSIĄGNIĘCIA NAUKOWO-BADAWCZE HABILITANTKI

Dr K. Jarzemska opublikowała łącznie 49 prac, wszystkie w czasopismach z tzw. listy filadelfijskiej (JCR), w tym 38 po uzyskaniu stopnia naukowego doktora. Wyniki prowadzonych przez nią badań naukowych zostały zacytowane około 700 razy a bez autocytowań ponad 500 razy. Indeks H wynosi 18 (za Web of Science). Habilitantka od 2015 roku kieruje projektem SONATA finansowanym ze środków Narodowego Centrum Nauki (2014/15/D/ST4/02856) pt.: „PHOTO-TRACE: Śledzenie dynamiki i zmian strukturalnych cząstek wzbudzanych światłem w kryształach i roztworach kompleksów koordynacyjnych metali grupy XI” o budżecie 897 630 zł. W latach 2013-2014 kierowała projektem pt.: „Tracing of photo- and electric-field-induced phenomena dynamics in organic and coordination systems in the solid state” finansowanym ze środków Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego (program Mobilność Plus) o budżecie 252 000 zł.

Publikacje z cyklu habilitacyjnego (H1-H9) są ze sobą powiązane tematycznie. W sześciu z nich (H2-H4 i H7-H9) jest zarówno autorem pierwszym jak i korespondencyjnym, a z wyjątkiem dwóch (H1 i H5) jej wkład w powstanie pozostałych – zgodnie z oświadczeniami – jest nie mniejszy niż 50%.

Rzeczywiście w przypadku kilku prac (H3, H4), których autorami jest czterech naukowców przypisywanie Habilitantce 70% udziału wydaje się problematyczne. Jednak Habilitantka jest pierwszym i korespondencyjnym autorem, a opis wkładu pracy Habilitantki nie budzi wątpliwości, tak więc określenie wkładu procentowego nie zmienia faktu o istotnym zaangażowaniu Habilitantki w otrzymanie wartościowych naukowo wyników; rola Habilitantki przy powstawaniu tych prac nie ulega wątpliwości. Sumaryczny Impact Factor prac wchodzących w skład osiągnięcia naukowego wynosi 36,46, średni na pracę aż 4,79.

Jak określa to Habilitantka celem prowadzonych przez nią prac naukowych było: *„badanie i opracowywanie materiałów, w określony sposób reagujących na bodziec zewnętrzny i wysyłających sygnał, który daje nam konkretną informację i który możemy dalej wykorzystać. W tym kontekście zbadanie i zrozumienie natury procesów przeniesienia ładunku, w obrębie cząsteczki czy też między molekułami, i towarzyszących im zjawisk, jest jednym z najważniejszych problemów, jakie współczesna nauka próbuje rozwikłać. Taka wiedza pozwoli w dalszej perspektywie na kontrolę pożądanych właściwości od pojedynczej cząsteczki do materiałów makroskopowych, a w konsekwencji przyczyni się do świadomego projektowania nowych materiałów funkcjonalnych czy też opracowania innowacyjnych rozwiązań technologicznych.”*

Na uznanie zasługuje fakt umiejętnego połączenia przez Habilitantkę różnych technik badawczych eksperymentalnych i kwantowo-chemicznych co pozwoliło osiągnąć postawione przez Habilitantkę cele. W szczególności otrzymała fluorowe pochodne kwasu *orto*-fenylenodiboronowego z 8-hydroksychinoliną, zaproponowała wyjaśnienia dla obserwowanego wpływu kwasowości centrów borowych na właściwości spektroskopowe w kontekście potencjalnego zastosowania w organicznych diodach luminescencyjnych (OLED) a także wpływu doboru rozpuszczalnika na powstające w wyniku krystalizacji struktury supramolekularne. Ponadto Habilitantka wyznaczyła doświadczalnie rozkłady gęstości elektronowej w kryształach zawierających dodatkowo 1,4-dioksan jako rozpuszczalnik i skorelowała parametry tego rozkładu z charakterem przejść elektronowych.

Osobiście jako bardzo ciekawe uważam, powiązanie wyników obliczeń TDDFT z danymi dotyczącymi struktury krystalicznej nowego foto-aktywnego układu koordynacyjnego zawierającego jony tytanu i żelaza. Na szczególne podkreślenie i pochwałę zasługuje fakt, że Habilitantka wraz ze współpracownikami opracowała nowy algorytm [ang. seed-skewness algorithm] pozwalający na wykrywanie sygnału dyfrakcyjnego w rentgenowskiej czasowo-rozdzielczej synchrotronowej

fotokrystalografii Lauego i uczestniczyła w napisaniu odpowiedniego oprogramowania użytego w interpretacji pomiarów wykonanych w pracy H9.

Podsumowując cykl prac, przedstawiony przez p. dr Katarzynę Jarzembką jako osiągnięcie naukowe w postępowaniu habilitacyjnej spełnia - moim zdaniem - wszystkie wymogi zarówno formalne, jak i zwyczajowe stawiane w tego rodzaju postępowaniach. Cykl prac jest interesujący, znajduje oddźwięk w literaturze naukowej i wnosi istotny wkład w poznanie zjawisk związanych z wyjaśnianiem natury procesów przeniesienia ładunku zachodzących pod wpływem światła w nowych foto-aktywnych kompleksach boru i wybranych układach metali przejściowych. Na szczególne uznanie zasługuje też liczba cytowań publikacji współautorstwa Habilitantki (przekraczająca 500) pokazująca, że osiągnięcia te weszły na dobre do światowego obiegu myśli. Co ważne Habilitantka potrafi z sukcesem wziąć udział pozyskiwaniu środków na badania naukowe.

DOROBEK DYDAKTYCZNY I POPULARYZUJĄCY NAUKĘ

W pracy dydaktycznej na Wydziale Chemii Habilitantka była promotorem trzech prac magisterskich. Prowadzi ćwiczenia i laboratoria z fizyki. Posiada doświadczenie w prowadzeniu ćwiczeń i zajęć laboratoryjnych z krystalografii, a Jej praca dydaktyczna jest doceniana. Włączyła się (wraz z Elżbietą Trzop) działania popularyzujące naukę np. poprzez przygotowanie części materiałów do warsztatów z dynamicznej strukturalnej foto-krystalografii na uniwersytecie w Buffalo w 2013 roku.

Podsumowując ten obszar aktywności dr Katarzyny Jarzembkiej dorobek dydaktyczny i popularyzujący naukę uznać należy za satysfakcjonujący.

WSPÓŁPRACA MIĘDZYNARODOWA

Już w czasie trwania studiów doktoranckich Habilitantka współpracowała z profesorem Claudem Lecomtem z Uniwersytetu w Nancy we Francji oraz z profesorem Larsem Liljasem z Uniwersytetu w Uppsali w Szwecji. Na pozytywne podkreślenie zasługuje fakt odbycia długotrwałego stażu podoktorskiego finansowanego ze środków programu „Mobilność Plus” w grupie profesora Philipa Coppensa z Uniwersytetu w Buffalo w Stanach Zjednoczonych czego bezpośrednim efektem są przynajmniej cztery publikacje:

- (1) Chen, Y.; Jarzemska, K. N.; Trzop, E.; Zhang, L.; Coppens, P. How Does Substitutional Doping Affect Visible Light Absorption in a Series of Homodisperse Ti 11 Polyoxotitanate Nanoparticles? *Chem. Eur. J.* **2015**, *21* (32), 11538–11544. doi: 10.1002/chem.201500961.
- (2) Jarzemska, K. N.; Chen, Y.; Nasca, J. N.; Trzop, E.; Watson, D. F.; Coppens, P. Relating Structure and Photoelectrochemical Properties: Electron Injection by Structurally and Theoretically Characterized Transition Metal-Doped Phenanthroline–Polyoxotitanate Nanoparticles. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2014**, *16* (30), 15792–15795. doi: 10.1039/C4CP02509A.
- (3) Jarzemska, K. N.; Kamiński, R.; Fournier, B.; Trzop, E.; Sokolow, J. D.; Henning, R.; Chen, Y.; Coppens, P. Shedding Light on the Photochemistry of Coinage-Metal Phosphorescent Materials: A Time-Resolved Laue Diffraction Study of an AgI–CuI Tetranuclear Complex *Inorg. Chem.* **2014**, *53* (19), 10594–10601. doi: 10.1021/ic501696y.

- (4) Negre, C. F. A.; Young, K. J.; Oviedo, M. B.; Allen, L. J.; Sánchez, C. G.; Jarzemska, K. N.; Benedict, J. B.; Crabtree, R. H.; Coppens, P.; Brudvig, G. W.; et al. Photoelectrochemical Hole Injection Revealed in Polyoxotitanate Nanocrystals Functionalized with Organic Adsorbates. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136* (46), 16420–16429. doi: 10.1021/ja509270f.

Podsumowując ten obszar aktywności dr Katarzyny Jarzembkiej należy ocenić wysoko pokazując bowiem, że Habilitantka potrafi z sukcesem wziąć udział we współpracy międzynarodowej.

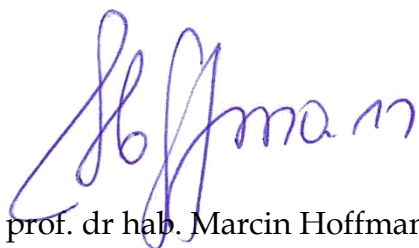
INNE

Na pozytywne podkreślenie zasługuje fakt, że Habilitantka bierze udział w dyskusji naukowej nad rozwojem Polskiej Nauki na co wskazuje jej zaangażowanie w dyskusje na temat ustawy 2.0, struktury uniwersytetów i roli młodych naukowców liderów grup badawczych.

WNIOSKI I PODSUMOWANIE

Wysoko oceniam aktywność naukową dr Katarzyny Jarzembkiej oraz inne aspekty jej działalności. Cykl publikacji naukowych stanowiący osiągnięcie naukowe wskazuje na samodzielność Habilitantki oraz na zbudowanie przez nią rozwiniętego i zróżnicowanego warsztatu naukowego do realizacji starannie zaplanowanych prac badawczych istotnych dla rozwoju chemii jako nauki. Habilitantka wydaje się już być samodzielnym pracownikiem naukowym, a więc stopień naukowy doktora

habilitowanego jest tylko potwierdzeniem tego faktu. Habilitantka wniosła istotny wkład w poznanie i wyjaśnianie zjawisk związanych z naturą procesów przeniesienia ładunku zachodzących pod wpływem światła w nowych fotoaktywnych kompleksach boru i wybranych układach metali przejściowych. Kompetencje naukowe dr Katarzyny Jarzembskiej sugerują dalszy dynamiczny rozwój Jej kariery naukowej. Kandydatka publikuje w bardzo dobrych żurnalach, a jej prace są dostrzegane w skali światowej. Reasumując stwierdzam, że dorobek Habilitantki spełnia bez zastrzeżeń wymagania prawne i zwyczajowe stawiane kandydatom do stopnia naukowego doktora habilitowanego w zakresie nauk chemicznych.

A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'Hoffmann'.

prof. dr hab. Marcin Hoffmann