

Prof. dr hab. Barbara Machura
Instytut Chemii
Wydział Matematyki, Fizyki i Chemii
Uniwersytet Śląski
ul. Szkolna 9
40-006 Katowice

Katowice, 12.04.2016

Ocena

**dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego
dr inż. Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej
w związku ze wszczęciem postępowania o nadanie Jej stopnia doktora habilitowanego
w dziedzinie nauk chemicznych i dyscyplinie chemia**

Informacje ogólne

Pani dr inż. Agata Trzęsowska-Kruszyńska jest absolwentką Wydziału Chemicznego Politechniki Łódzkiej. Studia ukończyła w 2002 uzyskując tytuł zawodowy magistra inżyniera chemii po przedstawieniu pracy dyplomowej „*Badanie właściwości azotanowych soli kompleksowych lantanowców(III) z heksametylenotetraaminą*”, którą wykonała pod kierunkiem prof. dr. hab. inż. Andrzeja Cygańskiego w Zespole Chemii Analitycznej i Koordynacyjnej. Pracę doktorską „*Metoda wartościowości wiązania dla kompleksów lantanowców*” realizowała w Zespole Rentgenografii Strukturalnej i Krystalochemii pod kierunkiem prof. dr. hab. inż. Tadeusza Bartzaka, a tytuł doktora nauk chemicznych uzyskała w lipcu 2006 roku. Godnym podkreślenia jest fakt, że za rozprawę doktorską Kandydatka otrzymała Nagrodę Prezesa Rady Ministrów (2007 rok).

Karierę zawodową dr inż. Agata Trzęsowska-Kruszyńska również związała z Instytutem Chemii Ogólnej i Ekologicznej PŁ, gdzie jest zatrudniona od października 2006, początkowo na stanowisku asystenta, a od 2007 – na stanowisku adiunkta.

Cykl habilitacyjny

Na przedstawiony mi do oceny wniosek habilitacyjny „*Chemia i analiza strukturalna wybranych związków z ugrupowaniem iminowym*” składa się 8 koncepcyjnie spójnych, oryginalnych artykułów opublikowanych w latach 2009-2015, autoreferat będący omówieniem i komentarzem do uzyskanych wyników badań oraz wykaz osiągnięć naukowych, dydaktycznych i organizacyjnych wraz z informacjami dotyczącymi współpracy naukowej i popularyzacji nauki. Autoreferat jest starannie zredagowany, a wyniki badań własnych Habilitantka przedyskutowała w odniesieniu do danych zawartych w 123 pozycjach literaturowych.

Udział Habilitantki w realizacji prac cyklu habilitacyjnego, od zdefiniowania problemu badawczego i wykonania eksperymentu, aż po opracowanie i interpretację wyników, nie budzi żadnych wątpliwości. Wszystkie publikacje wchodzące w skład cyklu habilitacyjnego mają bowiem monoautorski charakter, co w przypadku prac eksperymentalnych w chemii, wymagających obecnie stosowania zaawansowanych metod i technik pomiarowych, należy do rzadkości. Wszystkie prace zostały opublikowane w specjalistycznych i recenzowanych czasopismach naukowych z listy filadelfijskiej, a dwie z nich ukazały się w bardzo

prestżowych czasopismach o wysokim współczynniku wpływu, powyżej 4.0. Ocena bibliometryczna prac wchodzących do cyklu habilitacyjnego wypada bardzo dobrze. Łączny współczynnik oddziaływania dla tych publikacji wynosi 18,734, co daje dobrą średnią w przeliczeniu na jedną pracę, równą 2,342. Indeks cytowań prac habilitacyjnych wynosi 39, a bez autocytowań - 34.

Temat badawczy podjęty przez Habilitantkę w cyklu prac uważam za ważny, zarówno z poznawczego, jak i aplikacyjnego punktu widzenia. Dotyczy zasad Schiffa, hydrazonów i semikarbazonów w formie wolnych zasad, ich solwatów i związków koordynacyjnych. Ze względu na właściwości biologiczne, a szczególnie farmakologiczne, związki posiadające ugrupowanie iminowe zaliczane są do jednych z ważniejszych i często wykorzystywanych w chemii grup związków organicznych. Obecność w ich strukturze atomów posiadających wolne pary elektronowe powoduje również, że mogą pełnić funkcje ligandów, a w zależności od ilości i rozmieszczenia hereoatomów, tworzą jedno- lub wielojądrowe związki koordynacyjne z jonami metali - połączenia atrakcyjne dla chemii analitycznej, katalizy i chemii materiałów. W centrum szczególnego zainteresowania znajdują się związki typu MOF (*metal-organic frameworks*), wykazujące z reguły dużo bardziej interesujące właściwości fizykochemiczne od właściwości każdego komponentu z osobna, dzięki nałożeniu nowych warunków strukturalnych na właściwości prekursorów.

Wyniki badań przedstawione w pracach wchodzących w skład rozprawy habilitacyjnej dr inż. Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej można podzielić na trzy, blisko ze sobą jednak powiązane wątki tematyczne: (1) zbadanie wpływu oddziaływań międzycząsteczkowych na formę tautomeryczną i właściwości konformacyjne związków zawierających ugrupowanie iminowe, (2) poznanie roli oddziaływań niekowalencyjnych w procesie samoorganizowania się cząsteczek lub jonów w sieci krystalicznej oraz (3) określenie właściwości koordynacyjnych wybranych ligandów iminowych. Realizowana przez Habilitantkę tematyka w dużym stopniu wpisuje się w zagadnienia prężnie rozwijającej się inżynierii krystalicznej, która opierając się na zrozumieniu sił rządzących wzajemnym upakowaniem cząsteczek w kryształach, kowalencyjnych i niekowalencyjnych, ma na celu projektowanie i otrzymywanie związków o zdefiniowanych strukturach krystalicznych, będących materiałami o pożądanym, funkcjonalnym właściwościach.

Większość związków organicznych zawierających ugrupowanie iminowe i stosowanych w następnym kroku do badań strukturalnych, Habilitantka otrzymała wykorzystując klasyczne metody w roztworze, opierające się na reakcji kondensacji związków posiadających pierwszorzędowe grupy aminowe oraz aldehydów lub ketonów. Jedynie do syntezy hydrazonów będących pochodnymi hydrazynu kwasu izonikotynowego zastosowała metodą mechanochemiczną polegającą na ucieraniu i ogrzewaniu stechiometrycznych ilości substratów bez dodatku rozpuszczalnika organicznego. W porównaniu z tradycyjnymi metodami, syntezy mechanochemiczne zapewniają otrzymywanie produktu ze zdecydowanie wyższą wydajnością, jak również pozwalają na zminimalizowanie ilości lub całkowite wyeliminowanie rozpuszczalników, ograniczenie zużycia energii oraz skrócenie czasu reakcji. Dlatego, opracowanie bezroztworowej metody syntezy hydrazonów izoniazynu zaliczam do jednych z ważniejszych osiągnięć Habilitantki. Dużym osiągnięciem w zakresie syntezy jest również opracowanie jednoetapowej reakcji zamknięcia pierścienia triazolowego i otrzymanie triazoloftalazonów z ftalazyliidenohydrazonów. Szczególną zaletą tej metody jest brak konieczności stosowania dodatkowych środków utleniających czy katalizatorów zawierających metale. Badania Habilitantki potwierdziły, że tlen zawarty w rozpuszczalniku jest wystarczający do przebiegu reakcji utleniającej wewnątrzcząsteczkowej cyklizacji.

Analizy oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych w strukturach związków zawierających ugrupowanie iminowe dr inż. Agata Trzęsowska-Kruszyńska dokonywała

posługując się danymi strukturalnymi, a w interpretacji wyników badań często wspomagała się obliczeniami kwantowo-mechanicznymi w celu pełniejszego wyjaśnienia zaobserwowanych efektów strukturalnych.

Struktury cząsteczkowe i krystaliczne badanych związków Habilitantka wyznaczała metodą dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego na próbkach monokrystalicznych. W rezultacie swoich badań dotyczących roli oddziaływań niekowalencyjnych w procesie samoorganizowania się cząsteczek lub jonów w sieci krystalicznej wykazała:

- nietrwałość motywów dimerów ftalazyliidenohydrazonów czy semikarbazonów aldehydów aromatycznych utworzonych odpowiednio za pomocą wiązań wodorowych $N-H\cdots N$ i $N-H\cdots O$ w obecności innych akceptorów wiązania wodorowego, takich jak anion chlorkowy lub atomy tlenu rozpuszczalnika,
- dominujący wpływ oddziaływań $N^+-H\cdots Cl^-$ na wzajemne ułożenie jonów/cząsteczek w sieci krystalicznej w przypadku soli chlorkowych hydrazonów 1-hydrazynoftalazyny czy chlorowodoru semikarbazonu p-dimetylaminobenzaldehydu
- kluczową rolę oddziaływań π w upakowaniu triazoloftalazonów,
- istotny udział oddziaływań tworzonych przez podstawnik nitrowy (wiązań wodorowych $C-H\cdots O$ i oddziaływań $-NO_2\cdots \pi$) w stabilizowaniu struktur triazoloftalazonów i ftalazyliidenohydrazonów.

Interesujące wyniki Habilitantka uzyskała także badając wpływ oddziaływań niekowalencyjnych na formę tautomeryczną związków zawierających ugrupowanie iminowe. Występowanie zasady Schiffa pochodnej kwasu 2-aminobenzoesowego w formie jonu obojnaczego w ciele stałym Habilitantka przypisała tworzeniu oddziaływań międzycząsteczkowych z cząsteczkami wody obecnymi w strukturze krystalicznej. Efekt energetyczny tych oddziaływań przewyższa stabilizujący efekt wynikający z występowania wewnątrzcząsteczkowego wiązania wodorowego $O-H\cdots N$ charakterystycznego dla niejonowej formy. W ten sposób Habilitantka wykazała możliwość modyfikowania trwałości formy obojnaczej tych połączeń poprzez oddziaływania niekowalencyjne z innymi cząsteczkami tego samego bądź innego rodzaju. Również prowadząc badania nad tautomerią hydrazonów na przykładzie pochodnych hydrazynu kwasu nikotynowego potwierdziła, że międzycząsteczkowe wiązania wodorowe są kluczowym czynnikiem determinującym występowanie tych związków w ciele stałym w formie keto-aminowej.

Ważnym i cennym poznawczo wątkiem tematycznym realizowanym przez Habilitantkę są także badania dotyczące zdolności koordynacyjnych związków organicznych zawierających ugrupowanie iminowe. Na szczególne podkreślenie w tym zakresie zasługuje wykorzystanie *N'*-(2-hydroksybenzylideno)-nikotynohydrazidu jako jednostki budulcowej do konstrukcji polimerów koordynacyjnych ołowiu oraz wykazanie możliwości otrzymania związku koordynacyjnego zasady Schiffa w reakcji *in situ* pomiędzy glicyną, 2-furaldehydem i kationem miedzi(II).

Dużą wartością cyklu habilitacyjnego jest bogaty i oryginalny materiał eksperymentalny. Oprócz wyników badań strukturalnych i szczegółowej analizy oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych w sieci krystalicznej, Habilitantka szeroko dyskutuje dla otrzymanych związków także rezultaty badań spektroskopowych (w podczerwieni z transformacją Fouriera oraz w zakresie światła widzialnego i ultrafioletu), a dla próbek, które otrzymała w różnych odmianach polimorficznych koreluje różnice występujące w upakowaniu cząsteczek z różnicami we właściwościach fizycznych. Do badania morfologii próbek uzyskanych metodą bezrozpuszczalnikową wykorzystuje skaningową mikroskopię elektronową, natomiast za pomocą metody różnicowej kalorymetrii skaningowej określa czystość związków, wyznacza ich temperatury topnienia i bada trwałości odmian

polimorficznych. W swoich badaniach korzysta z szerokiego wachlarza technik eksperymentalnych, dowodząc, że jest wnikliwym i dojrzałym badaczem.

W kontekście wyżej wymienionych osiągnięć Habilitantki oceniam cykl habilitacyjny bardzo pozytywnie. Jest to opracowanie spójnie tematycznie, a prowadzone przez Habilitantkę badania mają nowatorski charakter na dobrym międzynarodowym poziomie. Wyniki Jej badań stanowią wszechstronną charakterystykę szeregu nowych związków zawierających ugrupowanie iminowe i wnoszą duży wkład do pełniejszego zrozumienia efektów strukturalnych użytecznych w inżynierii krystalicznej i w procesie projektowania nowych materiałów z horyzontem aplikacyjnym.

Nie mam żadnych wątpliwości, że w rozumieniu ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym z dnia 14 marca 2003 roku (Dz.U. nr 65 Ustawa 595) cykl pod wspólnym tytułem *Chemia i analiza strukturalna wybranych związków z ugrupowaniem iminowym* pełni rolę „osiągnięcia naukowego”.

Dorobek naukowy

Dorobek naukowy dr inż. Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej obejmuje ogółem 44 publikacje, w tym 42 oryginalne prace naukowe opublikowane w czasopismach znajdujących się w bazie Journal Citation Reports. Po doktoracie ukazało się 27 publikacji autorstwa i współautorstwa dr inż. Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej. Analiza tytułów publikacji potwierdza szerokie zainteresowania naukowe Habilitantki w zakresie chemii organicznej, koordynacyjnej i strukturalnej.

Sumaryczny wskaźnik oddziaływania IF obliczony w oparciu o bazę *ISI Web of Science* dla wszystkich publikacji wynosi 61,492. Opublikowane prace są dostrzegane przez międzynarodową społeczność naukową, były cytowane 287, a wynikający stąd indeks Hirscha dorobku dr inż. Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej jest równy 8. Są to wartości adekwatne do obecnego etapu kariery naukowej Habilitantki.

Świadectwem pozytywnej oceny naukowych osiągnięć jest również powoływanie Jej na recenzenta prac nadsyłanych do druku w międzynarodowych czasopismach z listy filadelfijskiej, w tym *Acta Crystallographica B: Structural Science, Crystal Growth and Design, Journal of Coordination Chemistry, Journal of Molecular Structure, Spectrochimica Acta Part A, Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*.

Kandydatka wprawdzie nie odbyła żadnego stażu naukowego ale ściśle współpracuje z ośrodkami zagranicznymi, realizując z nimi wspólne projekty „*Badania strukturalne związków heteroatomowych (w tym zasad Schiffa) oraz ich połączeń koordynacyjnych o właściwościach przeciwnowotworowych oraz katalitycznych*” (we współpracy z dr Mohammedem Azamem) oraz „*Badania strukturalne związków koordynacyjnych zasad Schiffa o właściwościach biologicznych*” (we współpracy z dr Tanmayem Chattopadhyayem). Tytuły projektów ujęłam w recenzji celowo, bo jednoznacznie potwierdzają, że Habilitantka jest postrzegana przez międzynarodowe środowisko naukowe jako ekspert w zakresie fizykochemii związków zawierających ugrupowanie iminowe.

Pozytywnie oceniam także doświadczenie Kandydatki w zakresie realizacji projektów badawczych. Była kierownikiem dwóch projektów badawczych finansowanych przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego w ramach programu "Iuventus Plus", jednego grantu wewnętrznego finansowanego z Funduszu Młodych Naukowców na Wydziale Chemicznym Politechniki Łódzkiej oraz współwykonawcą w dwóch grantach obliczeniowych.

Wyrazem uznania dla osiągnięć naukowych dr inż. Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej były dwie nagrody indywidualne oraz dwie zespołowe JM Rektora PŁ.

Działalność dydaktyczna i organizacyjna

Od roku akademickiego 2011/2012 dr inż. Agata Trzęsowska-Kruszyńska jest kierownikiem laboratorium z chemii ogólnej i nieorganicznej dla studentów kierunku Chemia i Technologia Chemiczna. Prowadziła i prowadzi liczne zajęcia laboratoryjne i seminaryjne dla studentów różnych kierunków, zarówno I stopnia jak i magisterskich, z zakresu chemii ogólnej i nieorganicznej, toksykologii, ekotoksykologii, technologii chemicznej, analizy instrumentalnej, informatyki i komputerowych baz danych oraz angielskiej terminologii. Była promotorem 6 dyplomowych prac magisterskich, 1 dyplomowej pracy inżynierskiej oraz opiekunem naukowym doktorantki. Na szczególną uwagę zasługuje aktywny udział Habilitantki przy opracowywaniu programu zajęć i przygotowaniu materiałów dydaktycznych dla studentów. Od 2011 wchodzi w skład Komisji Kierunkowej dla kierunku Chemia i sprawuje nadzór nad programem kształcenia oraz przygotowuje opis efektów kształcenia. Jest koordynatorem dla kierunku chemia ds. przygotowywania kierunku do aplikacji o przedłużenie certyfikatu ECTS Label. Od 2010 roku pełni także funkcję Zastępcy Przewodniczącego Wydziałowej Komisji Rekrutacyjnej Wydziału Chemicznego.

Podsumowanie i wnioski końcowe

Przedstawiona powyżej ocena rozprawy habilitacyjnej oraz dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego dr inż. Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej pozwala mi stwierdzić, że jest Ona dojrzałym pracownikiem naukowym, dobrze przygotowanym do podjęcia samodzielnej pracy naukowej, dydaktycznej i organizacyjnej. Przedstawiony cykl 8 oryginalnych publikacji potwierdza Jej istotny wkład w rozwój chemii związków zawierających ugrupowanie iminowe i chemii strukturalnej. Na tej podstawie stwierdzam, że osiągnięcia naukowe dr inż. Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej spełniają kryteria określone w artykule 13 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. „O stopniach naukowych i tytule naukowym oraz stopniach w zakresie sztuki” (Dz. U. nr. 65 poz. 595 wraz z późniejszymi zmianami), a także rozporządzenia Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego w sprawie szczegółowego trybu przeprowadzania czynności w przewodach doktorskim i habilitacyjnym oraz w postępowaniu o nadanie tytułu profesora z dnia 15 stycznia 2004 roku (Dz.U. nr 15 poz. 128 wraz z późniejszymi zmianami) i wnoszę o dopuszczenie dr inż. Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

Barbara Karłowska