



UNIwersytet
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

prof. dr hab. Krzysztof Lewiński

Kraków, 11.04.2016

Ocena osiągnięcia habilitacyjnego dr inż. Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej „Chemia i analiza strukturalna wybranych związków z ugrupowaniem iminowym” oraz całokształtu dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego

Wydział Chemii

Pani dr inż. Agata Trzęsowska-Kruszyńska, adiunkt na Wydziale Chemicznym Politechniki Łódzkiej złożyła wniosek o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego. Ze swojego dorobku naukowego dr Trzęsowska-Kruszyńska wybrała 8 oryginalnych artykułów opublikowanych w latach 2009-2015, które pod wspólnym tytułem „Chemia i analiza strukturalna wybranych związków z ugrupowaniem iminowym” wraz z pozostałą wymaganą przepisami dokumentacją przedłożyła do oceny.

Dr inż. Agata Trzęsowska-Kruszyńska jest absolwentką Wydziału Chemicznego Politechniki Łódzkiej. Studia ukończyła w roku 2002 broniąc pracę magisterską pt. „Badanie właściwości azotanowych soli kompleksowych lantanowców(III) z heksametylenotetraaminą” wykonaną pod kierunkiem prof. dr hab. inż. Andrzeja Cygańskiego i uzyskując tytuł magistra inżyniera w zakresie Technologii chemicznej nieorganicznej. Stopień doktora nauk chemicznych w zakresie chemii uzyskała cztery lata później. Jej rozprawa doktorska, za którą w roku 2007 uzyskała nagrodę Prezesa Rady Ministrów, zatytułowana „Metoda wartościowości wiązania dla kompleksów lantanowców” została wykonana również na Wydziale Chemicznym Politechniki Łódzkiej w Zespole Rentgenografii Strukturalnej i Krystalochemii a promotorem był prof. dr hab. inż. Tadeusz Bartczak. Dalsza kariera naukowa pani Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej jest w dalszym ciągu związana z tym Zespołem. Po rocznej asystenturze, od roku 2007 do chwili obecnej jest zatrudniona na stanowisku adiunkta.

ul. Ingardena 3

PL 30-060 Kraków

tel. +48(12) 633 63 77

fax +48(12) 634 05 15

sekretar@chemia.uj.edu.pl

www.chemia.uj.edu.pl

Ocena całkowitego dorobku naukowego

Dorobek naukowy przedstawiony przez dr inż. Agatę Trzęsowską-Kruszyńską w załączonej dokumentacji obejmuje łącznie 42 prace podzielone na: 8 prac stanowiących podstawę osiągnięcia naukowego, 15 prac opublikowanych przed uzyskaniem stopnia doktora, 19 prac po doktoracie a ponadto 2 prace w czasopismach spoza listy filadelfijskiej (JCR). Sumaryczny współczynnik wpływu (Impact Factor) podany przez Habilitantkę w oparciu o wartości z roku publikacji wynosi 61,492 natomiast indeks Hirscha wynosi 8. Analizując tę listę stwierdziłem, że aktualnie aż 13 prac dołączyło do grupy nie uwzględnianej przez Journal Citation Reports. Jest to 11 prac, które ukazały się w Acta Crystallographica Section E w latach 2004-2007 oraz 2 inne. Pozostawia to 29 publikacji, których łączny IF wg aktualnych wartości wynosi 54,657 co daje średnią wartość na publikację ok. 1,9. Całkowita liczba cytowań wg. bazy Scopus wynosi 314 (297 bez autocytowań) a wg. Web of Science 310 (285). Wynik ten należałoby uznać za bardzo dobry gdyby nie fakt, że blisko 1/3 cytowań dotyczy tylko jednej publikacji z roku 2004, która była pierwsza w dorobku Habilitantki a przeszło połowa cytowań odnosi się do łącznie trzech prac z lat 2004-2006. Inne publikacje cytowane są znacznie rzadziej. Należy jednak zwrócić uwagę, że zdecydowana większość dorobku, bo aż 20 prac to publikacje jednoautorskie lub takie, w których Habilitantka deklaruje udział nie mniejszy od 50%. Świadczy to o Jej dominującym wkładzie w realizację badań. Nawet bez uwzględnienia publikacji, które obecnie nie znajdują się na liście JCR, całkowity dorobek uważam za znaczący i spełniający oczekiwania wobec kandydatów ubiegających się o stopień doktora habilitowanego.

Do dorobku naukowego należy też zaliczyć 22 prezentacje na konferencjach naukowych. Niestety, ta część dorobku jest wyraźnie słabsza. Z jednym tylko wyjątkiem są to konferencje krajowe, prawie wyłącznie Konwersatoria Krystalograficzne lub Zjazdy Polskiego Towarzystwa Chemicznego. Wszystkie prezentacje mają postać posterów, pani Trzęsowska-Kruszyńska jest autorem prezentującym w 13 przypadkach. Od Habilitantki oczekiwałbym zarówno aktywnego udziału w konferencjach międzynarodowych jak też pewnej liczby wystąpień ustnych na przykład w ramach Konwersatoriów Krystalograficznych, które stanowią znakomitą platformę prezentacji przez młodych ludzi swoich osiągnięć. Moje zdziwienie a równocześnie pewien niepokój budzi fakt, że po roku 2010 Habilitantka była autorką i współautorką tylko dwóch prezentacji konferencyjnych, co świadczy o słabym zaangażowaniu w życie środowiska naukowego.

Ważną pozycję w ocenie dorobku naukowego stanowi udział w realizacji projektów badawczych. W tym zakresie pani Agata Trzęsowska-Kruszyńska może pochwalić się

kierownictwem dwóch projektów MNiSW w ramach programu „Juventus Plus” w latach 2010-2011 i 2012-2014. Habilitantka wymienia też udział w realizacji dwóch projektów kierowanych przez partnerów zagranicznych z Arabii Saudyjskiej i Indii, jednak z dokumentacji nie wynika, aby była to współpraca w jakiś sposób sformalizowana.

Brak jest w karierze naukowej pani Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej choćby krótkoterminowego stażu podoktorskiego. Zwracam na to uwagę, gdyż oprócz istotnego znaczenia dla rozwoju naukowego, odbycie stażu jest też jednym z kryteriów oceny dorobku habilitanta zgodnie z Rozporządzeniem Ministra.

Osiągnięcia naukowe pani Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej były wielokrotnie nagradzane. Oprócz wspomnianej już nagrody Prezesa Rady Ministrów, w latach 2008-2015 była czterokrotnie nagradzana przez Rektora PŁ. Świadectwem uznania przez środowisko naukowe jej kompetencji były też powierzane jej aż 35 razy recenzje artykułów w uznanych zagranicznych czasopismach naukowych.

Ocena osiągnięcia habilitacyjnego

Cykl publikacji przedstawiony jako osiągnięcie naukowe obejmuje 8 oryginalnych prac, które zostały opublikowane w latach 2009-2015. Ich łączny współczynnik wpływu IF wynosi 19,417 a średni 2,527 według aktualnych wartości zawartych w bazie JCR, co świadczy o tym, że ukazały się one w dobrych czasopismach naukowych. Całkowita liczba cytowań w/w publikacji wynosi 40 (Scopus), natomiast średnia wynosi 5, co jest wynikiem niezbyt wysokim, ale po części wynikającym z tego, że część tych prac ukazała się niezbyt dawno. Zaskakujący jest fakt, że żadna z prac tego cyklu nie była przez Autorkę cytowana w kolejnych publikacjach. Budzi to na wstępie pewne wątpliwości, czy rzeczywiście prace te stanowią cykl o spójnej tematyce, jednak bliższe przyjrzenie się tym pracom rozwiewa wątpliwości.

Przedmiotem badań dr inż. Trzęsowskiej-Kruszyńskiej były związki zawierające ugrupowanie iminowe i ich pochodne, w szczególności hydrazony i semikarbazony. W pracach z początkowego okresu Habilitantka badała związki w postaci wolnych zasad i solwatów, trzy późniejsze prace z cyklu dotyczą związków będących ligandami w utworzonych związkach koordynacyjnych z jonami miedzi, ołowiu i rtęci. Główne techniki badawcze zastosowane konsekwentnie we wszystkich pracach to przede wszystkim rentgenowska analiza strukturalna monokryształów oraz spektroskopia IR i obliczenia kwantowo-mechaniczne.

Tematyka i zakres prac wpisują się w nurt badań ogólnie nazywanych inżynierią krystaliczną. Wynika to przede wszystkim z koncepcji badań prowadzonych przez panią dr inż. Agatę Trzęsowską-Kruszyńską. Syntezowane związki są badane w postaci krystalicznej a przedmiotem dyskusji jest obecność oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych oraz ich wpływ na strukturę elektronową i konformację tych związków oraz możliwość tworzenie przez nie układów supramolekularnych. We wszystkich pracach, badaniom strukturalnym towarzyszą obliczenia kwantowo-mechaniczne, których celem było między innymi wyznaczenie optymalnej geometrii izolowanych związków oraz wyznaczenie energii bariery rotacji dla różnych konformerów. Wyniki obliczeń umożliwiły w szeregu przypadkach wykrycie różnic pomiędzy strukturami przewidywanymi a wyznaczonymi eksperymentalnie i ich wyjaśnienie. Przykładem takiej pracy jest **H-1**, w której Habilitantka wyjaśnia, dlaczego badany semikarbazon jest izomerem E a nie Z i jakie jest znaczenie tej konfiguracji z punktu widzenia aktywności biologicznej. Z kolei w pracy **H-2**, wykazała, że istniejący w kryształie tautomer pochodnej kwasu 2-aminobenzoowego jest niekorzystny energetycznie a jest to możliwe gdyż jego struktura jest stabilizowana przez wewnątrzcząsteczkowe wiązanie wodorowe. Podobne obserwacje zawarte są w pracy **H-3**. Pochodne hydrazynu kwasu nikotynowego występują w ciele stałym w formie keto-aminowej zamiast spodziewanej enolowo-iminowej. Badania zarówno wolnych hydrazonów jak i ich chlorowodorków wykazały, że kluczowe dla stabilizacji tej formy są wiązania wodorowe oraz oddziaływania $\pi \cdots \pi$.

Pani dr inż. Agata Trzęsowska-Kruszyńska w swoich pracach wykorzystwała też iminy jako ligandy w związkach koordynacyjnych. Między innymi w pracy **H-4**, zasada Schiffa utworzona w wyniku reakcji glicyny z 2-furaldehydem jest ligandem w związku koordynacyjnym z jonem miedzi(II) co stabilizuje powstały związek. Dzięki temu możliwe było wykazanie, że dominującą formą powstałej zasady Schiffa w roztworze i ciele stałym jest jon obojnaczy. Kolejnym przykładem wykorzystania jonów metali są związki koordynacyjne ołowiu (**H-6**). Habilitantka w zależności od rodzaju użytego anionu uzyskiwała związki z ołowiem na II lub IV stopniu utlenienia, w których hydrazon pełnił rolę linkera w sieci metaloorganicznej. Zwróciła też uwagę na rolę oddziaływań jonu ołowiu z elektronami π . Podobny charakter mają badania przedstawione w pracy **H-7**, w której jako ligandy dla związku koordynacyjnego rtęci(II) wykorzystane zostały tiosemikarbazony.

Istotnym elementem prac była synteza badanych związków prowadząca do otrzymania preparatu w formie krystalicznej. Oprócz klasycznych reakcji w roztworze Habilitantka proponowała i zastosowała też metodę bezropuszczalnikową do syntezy hydrazonów

(H-5) i wykazała w oparciu o obliczenia kwantowo-mechaniczne ścieżki reakcji, że powstająca w reakcji woda ma pozytywny wpływ na przebieg reakcji natomiast stosowany w tradycyjnej syntezie rozpuszczalnik organiczny jest zbędny. Istotna jest również obserwacja, że produkt tak prowadzonej reakcji ma postać mikrokryształiczną.

Do najważniejszych osiągnięć cyklu należy również zaliczyć syntezę triazoloftalazynów przedstawioną w pracy H-8. Habilitantka zaproponowała nową metodę syntezy, w której tlen zawarty w rozpuszczalniku jest czynnikiem wywołującym wewnątrzcząsteczkową cyklizację.

Warto wspomnieć, że obie powyższe prace, H-5 i H-8, ukazały się w znakomitych czasopismach, odpowiednio Crystal Growth and Design oraz CrystEngComm, co jest potwierdzeniem bardzo wysokiego poziomu naukowego prac również w zakresie syntezy nowych związków.

Ocena dorobku dydaktycznego i organizacyjnego

Dr inż. Agata Trzęsowska-Kruszyńska posiada bogaty dorobek dydaktyczny obejmujący prowadzenie ćwiczeń i laboratoriów, głównie w ramach kursów chemii i toksykologii dla kierunków Chemia, Ochrona Środowiska oraz Technologia Chemiczna. Dokumentacja zawiera listę łącznie 11 kursów, w których Habilitantka prowadziła zajęcia. Pełniła funkcję kierownika laboratorium z Chemii ogólnej i nieorganicznej, była opiekunem studentów na kierunku Ochrona Środowiska a od roku 2012 jest opiekunem kierunku Chemia. Była też promotorem 6 prac magisterskich oraz jednej pracy inżynierskiej. Ponadto, była opiekunem projektu naukowego realizowanego przez studenta Wydziału Chemicznego PŁ a obecnie jest opiekunem naukowym doktorantki w Zespole Rentgenografii Strukturalnej i Krystalochemii.

Działalność organizacyjna Habilitantki jest związana z różnymi aspektami organizacji procesu dydaktycznego. Od wielu lat jest członkiem Wydziałowej Komisji Rekrutacyjnej a od roku 2010 pełni funkcję Zastępcy Przewodniczącego tej Komisji. Jest też członkiem Komisji nadzorującej program kształcenia na kierunku Chemia oraz brała udział jako Koordynator kierunku Chemia w przygotowywaniu dokumentacji w celu uzyskania prestiżowego certyfikatu ECTS Label.

Podsumowanie

Analiza dokumentacji przedstawionej przez dr inż. Agatę Trzęsowską-Kruszyńską pozwala mi z całym przekonaniem stwierdzić, że Kandydatka posiada udokumentowane

kompetencje i doświadczenie umożliwiające prowadzenie samodzielnej i twórczej pracy naukowej oraz kierowanie swoim zespołem badawczym, jako samodzielny pracownik naukowy. Szczególnie jaskrawym dowodem Jej kompetencji, jest fakt, że wszystkie prace w cyklu stanowiącym osiągnięcie naukowe są pracami jednoautorskimi. Jest to bardzo rzadki przypadek w przypadku habilitacji, której podstawą są prace o charakterze eksperymentalnym. Dobitnie świadczy to zarówno o znakomitym opanowaniu warsztatu jak też dużej dojrzałości naukowej. Dodatkowym potwierdzeniem uznania Jej kompetencji przez środowisko naukowe jest, wspomniane już przeze mnie, bardzo częste powierzanie Jej recenzji artykułów w czasopismach naukowych o dużej renomie. Oceniając przedstawione przez Habilitantkę osiągnięcia naukowe stwierdzam, że bez wątpienia spełniają one warunki nowości naukowej i wnoszą istotny wkład w rozwój dziedziny naukowej.

Uważam, że w świetle kryteriów określonych w art. 16 ustawy z dnia 14 marca 2003 roku o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki wraz ze zmianami opublikowanymi w Dz. U. Nr 84, poz. 455 z 2011 roku, przedstawione do oceny materiały stanowią wystarczającą podstawę do ubiegania się przez dr inż. Agatę Trzęsowską-Kruszyńską o stopień doktora habilitowanego nauk chemicznych w dyscyplinie chemia.



prof. dr hab. Krzysztof Lewiński