

Recenzja rozprawy habilitacyjnej (osiągnięcia naukowego) „*Chemia i analiza strukturalna wybranych związków z ugrupowaniem iminowym*” oraz całości dorobku zawodowego dr Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej

W związku z rozpoczętą na Wydziale Chemicznym Politechniki Łódzkiej procedurą habilitacyjną dr Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej, adiunkta na Wydziale Chemicznym PŁ i z powołaniem mnie w skład komisji habilitacyjnej w tym postępowaniu (powołanie komisji nastąpiło 10 marca 2016), otrzymałem do recenzji zestaw dokumentów obejmujący m.in. autoreferat, kopie publikacji stanowiących oceniane osiągnięcie naukowe, a także wykaz opublikowanych prac naukowych wraz z ich analizą scjentometryczną oraz informacje o osiągnięciach dydaktycznych, współpracy naukowej i popularyzacji nauki.

Pani dr Agata Trzęsowska-Kruszyńska uzyskała tytuł zawodowy magistra inżyniera w zakresie technologii chemicznej nieorganicznej w 2002 roku na Wydziale Chemicznym Politechniki Łódzkiej (Zespół Chemii Ogólnej i Ekologicznej). W roku 2006, na tym samym Wydziale, obroniła wykonaną pod kierunkiem prof. dr hab. Tadeusza Bartczaka rozprawę doktorską zatytułowaną „Metoda wartościowości wiązania dla kompleksów lantanowców”. Od października 2006 jest zatrudniona w Instytucie Chemii Ogólnej i Ekologicznej na Wydziale Chemicznym PŁ: do września 2007 na stanowisku asystenta, od października 2007 do dzisiaj – adiunkta.

Ocena aktywności naukowej

Dorobek naukowy Habilitantki obejmuje 42 publikacje w czasopismach z listy JCR, z czego 15 zostało opublikowanych przed, a 27 po doktoracie. Sumaryczny czynnik wpływu tych publikacji wynosi 61,492, według WoS były one cytowane 263 razy (bez autocytowań), a indeks Hirscha wynosi 8. Uwagę zwraca duża liczba cytowań prac opublikowanych z

prof. Bartczakiem w Acta Cryst. part B, prawdopodobnie zawierających wyniki rozprawy doktorskiej. Te trzy prace były cytowane w sumie 163 razy, dając niemal 62% wszystkich cytowań prac Habilitantki. Prace dr Trzęsowskiej-Kruszyńskiej były publikowane w czasopismach o zróżnicowanych czynnikach wpływu, od Acta Cryst. part E (IF ok. 0.5, 11 prac), poprzez J. Mol. Struct. (IF ok. 1.5, 4 prace), aż po prace w CrystEngComm (IF 4.034) i Cryst. Growth Des. (4.558). Można zauważyć chwalebną tendencję Habilitantki do publikowania w czasopismach o coraz wyższym czynniku wpływu.

Dorobek naukowy Habilitantki obejmuje również dwa artykuły w czasopismach nieznajdujących się w bazie Journal Citation Reports, a także 22 komunikaty posterowe na konferencjach naukowych, w zasadzie – poza jednym przypadkiem – wyłącznie krajowych: są to Konwersatoria Krystalograficzne, jeden Zjazd PTChem i dwa zjazdy Sekcji Studenckiej PTChem. O Jej międzynarodowej rozpoznawalności świadczy recenzowanie ponad 30 prac nadesłanych do czasopism o ogólnoświatowym zasięgu (głównie J.Coord.Chem., ale także np. Acta Cryst. B i Cryst. Growth Des.).

Dwukrotnie była kierownikiem (laureatem) grantów Iuventus Plus, przyznawanych przez MNiSW, uzyskała grant wewnętrzny Wydziału Chemicznego PŁ oraz brała udział w realizacji grantów obliczeniowych (ACK Cyfronet). Nie ma w dokumentacji informacji o uczestnictwie w innych projektach finansowanych przez agencje grantowe (NCN, NCBiR), jest za to informacja o bliżej niezidentyfikowanych projektach realizowanych we współpracy z dr Azamem z King Saud University oraz z dr Tanmayem Cahttopadhyayem z Panchakot Mahavidyalya (Indie). Brak niestety więcej informacji na temat tych projektów.

Jedynym poważniejszym zastrzeżeniem dotyczącym aktywności naukowej p. dr Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej jest brak staży poza macierzystym ośrodkiem, co również można połączyć ze stosunkowo niewielkim zakresem współpracy z innymi grupami badawczymi. Sądząc jednak po ostatniej aktywności Habilitantki – kilka publikacji z grupami z Indii i Arabii Saudyjskiej – powinno się to zmieniać w najbliższym czasie.

Za osiągnięcia naukowe Habilitantka została wyróżniona nagrodą Prezesa Rady Ministrów za rozprawę doktorską (2007), otrzymała też kilkakrotnie indywidualne i zespołowe nagrody Rektora Politechniki Łódzkiej.

Aktywność naukowa dr Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej, w tym również dorobek po doktoracie, spełnia wymagania stawiane habilitantom. Pewne zdziwienie – biorąc pod uwagę znaczny dorobek publikacyjny - budzi niska stosunkowo aktywność Habilitantki w przedstawianiu swoich wyników na konferencjach naukowych, w szczególności brak komunikatów ustnych lub wykładów. Nie jest to jednak, zdaniem recenzenta, przeszkoda w pozytywnej ocenie całości dorobku, a może być traktowane jako sugestia na przyszłość.

Osiągnięcie naukowe

Przedmiotem habilitacji (osiągnięciem naukowym) jest jednotematyczny cykl ośmiu artykułów, których jedynym autorem jest p. dr Trzęsowska-Kruszyńska. Publikacje te ukazały się w latach 2009 – 2015, w czasopiśmie o sumarycznym czynniku wpływu 18.734, i jak dotąd były cytowane 34 razy według Web of Science. Kilkunastostronicowy, kompetentnie napisany komentarz uzupełnia wspomniany cykl prac. Wydaje się jednak, że Autorka mogłaby zrezygnować z kilku ewidentnych truizmów na rzecz chociażby uwypuklenia przewodniej idei cyklu prac.

Tematyka tych prac związana jest z syntezą i analizą strukturalną kilku grup związków: zasad Schiffa, hydrazonów i semikarbazonów, posiadających jako wspólny element strukturalny ugrupowanie iminowe. Związki takie należą do najczęściej używanych w syntezie chemicznej, a jednocześnie wykazują różnorodną aktywność biologiczną i są często stosowane np. w medycynie. O ich popularności świadczą mogą 123 prace, cytowane w komentarzu Habilitantki.

Panią doktor Trzęsowską-Kruszyńską najbardziej interesowały badania podstawowe, a taki wybór przedmiotu badań pozwolił Jej na zajęcie się szerokim spektrum problemów chemicznych, od izomerii, poprzez oddziaływania międzycząsteczkowe i ich hierarchie, tworzenie związków kompleksowych, po syntezę mechanochemiczną i zjawisko polimorfizmu. Autorka używała w tym celu imponująco różnorodnych metod badawczych: dyfrakcję promieni rentgenowskich jako metodę podstawową, ale także różnicową kalorymetrię skaningową, spektroskopię FTIR i UV Vis, skaningową mikroskopię elektronową i obliczenia kwantowomechaniczne. To bogactwo używanych technik jest tym bardziej warte podkreślenia, że Habilitantka jest jedyną autorką wszystkich zebranych w cykl prac.

Można – nieco upraszczając – podzielić oceniane osiągnięcie naukowe na trzy składniki. Pierwszy z nich to strukturalne badania organicznych związków zawierających ugrupowanie iminowe. Zamieściłbym tutaj prace **H1** – **H3**, pozostawiając do osobnego omówienia pracę **H8**, formalnie również należącą do tej grupy. W pracach tych Habilitantka opisuje bardzo szczegółowe i wielostronne badania kilku związków: obojętnego semikarbazonu i jego soli chlorkowej (**H1**), zasady Schiffa i jej soli chlorkowej (**H2**) oraz dwóch hydrazonów (**H3**). Doświadczalne badania strukturalne są wsparte przez obliczenia metodami chemii kwantowej oraz wynikami badań spektroskopowych, co pozwala Autorce na wszechstronne uzasadnienie swoich nietrywialnych tez. W przypadku pracy **H1** jest to analiza oddziaływań międzycząsteczkowych i zmiany preferencji (hierarchii) oddziaływań wskutek protonowania i obecności anionu. W dwóch pozostałych publikacjach tematem zasadniczym, również opisanym w oparciu o badania strukturalne wsparte obliczeniami

i danymi spektroskopowymi, jest tautomeria i wpływ oddziaływań międzycząsteczkowych na występowanie szczególnego, pozornie niekorzystnego energetycznie, tautomeru w ciele stałym. Moją uwagę zwróciło również zauważenie, i próba wyjaśnienia, obecności rozpuszczalników (wody, metanolu) w wielu związkach opisanych w pracach **H1 – H3** i **H8**.

Drugi nurt badań Pani dr Trzęsowskiej-Kruszyńskiej to związki kompleksowe, tworzone przez zasadę Schiffa (**H4**), hydrazon (**H6**) i semikarbazon (**H7**). Każda z tych prac to znowu bardzo szeroko przeprowadzone badania, obejmujące rentgenowską analizę strukturalną, obliczenia teoretyczne i badania spektroskopowe. W pracy **H4** zasada Schiffa, która utworzyła kompleks z miedzią, została zsyntezowana *in situ*, usiłowania uzyskania samego, nieskompleksowanego liganda nie powiodły się. Z kolei badania nad kompleksami ołowiu z pochodną nikotynohydrazidu (**H6**) wykazały możliwość uzyskania w tym wypadku koordynacyjnych polimerów. Jako substancje wyjściowe użyto octanu i azotanu ołowiu(II), a zaskakująco okazało się, że w uzyskanych polimerach ołów występuje na dwóch różnych stopniach utlenienia, jako Pb(II) i Pb(IV). Dogłębnie zanalizowana, również z pomocą metod obliczeniowych, została rola oddziaływań Pb... π w jednym z badanych kompleksów. W przypadku kompleksów semikarbazonu z rtęcią(II) (**H7**) uzyskano dwa kompleksy (z azotanu i chlorku rtęci), w których tiosemikarbazon występował w nietypowej, obojętnej formie. Autorka wskazała niespodziewany wpływ nieorganicznego anionu na sposób, w jaki ligand łączy się z jonem centralnym (S,N- albo S-).

Trzeci kierunek zainteresowań Habilitantki to bezrozpuszczalnikowa synteza hydrazonów izoniazydu w postaci mikrokryształicznej (**H5**). W tej pracy Autorka pokazała, że stosując ogrzewanie i mieszanie mieszaniny substratów (izoniazydu i związku zawierającego grupę karbonylową, najczęściej aldehydu) na płytce grzejnej, bez dodatku rozpuszczalników organicznych. Powstające związki zostały zidentyfikowane na podstawie ich dyfraktogramów proszkowych (struktury monokryształiczne były znane wcześniej). Obliczenia teoretyczne pokazały również, że woda – uboczny produkt reakcji – jest istotna w obniżeniu bariery energetycznej, i nie potrzeba już żadnego dodatkowego rozpuszczalnika.

Na koniec zostawiłem pracę **H8**, która – chociaż, jak wspomniano, mogłaby zostać zaliczona do grupy pierwszej – jest elementem osobnym. Moim zdaniem bardzo pięknie i bez wątpliwości pokazuje ona drogę rozwoju Habilitantki, oraz Jej potencjalne możliwości. Jest to praca w dużej mierze kompletna, w której p. dr Trzęsowska-Kruszyńska (warto przypomnieć – jedyna autorka tej publikacji) bada wpływ grupy nitrowej na właściwości i strukturę serii triazoloftalazonów i ftalazyliidenohydrazonów. Praca (opublikowana w CrystEngComm) jest dziełem dojrzałego naukowca. Habilitantka wykonała syntezę dobrze zaplanowanych pochodnych i soli, scharakteryzowała strukturalnie otrzymane związki, przeanalizowała oddziaływania międzycząsteczkowe i na podstawie tych wyników oraz obliczeń energii oddziaływań pomiędzy grupami nitrowymi w związkach modelowych wyprowadziła wnioski opisujące rolę grup nitrowych w architekturze kryształów tej grupy związków. Niejako

mimoходом przeprowadziła interesującą analizę wzajemnych zależności między dwoma formami polimorficznymi jednej z otrzymanych substancji.

Cykl ośmiu prac, przedstawiony przez p. dr Agatę Trzęsowską-Kruszyńską jako osiągnięcie naukowe w procedurze habilitacyjnej spełnia, moim zdaniem, wszystkie wymogi – zarówno formalne, jak i zwyczajowe – stawiane w tego rodzaju postępowaniach. Cykl prac jest bardzo interesujący, znajduje oddźwięk w literaturze naukowej i wnosi istotny wkład w poznanie i wyjaśnienie chemii i struktury związków z ugrupowaniem iminowym. Warty podkreślenia jest widoczny w tym cyklu rozwój Habilitantki – od dogłębnej analizy strukturalnej, popartej obliczeniami i danymi spektroskopowymi, do szerokich, precyzyjnie zaplanowanych wielostronnych badań grupy związków, swobodnie rozwijających się w nowych kierunkach.

Charakterystyka dorobku dydaktycznego i organizacyjnego

Pani dr Trzęsowska-Kruszyńska była jak do tej pory w rozmaity sposób zaangażowana w dydaktykę na macierzystej uczelni. Prowadziła różne zajęcia ze studentami: laboratoria (chemia ogólna i nieorganiczna, analityka medyczna, chemia, toksykologia, ekotoksykologia, informatyka i komputerowe bazy danych, analiza instrumentalna) i ćwiczenia (chemia, chemia ogólna, technologia chemiczna i surowce, przemysłowa analiza chemiczna, angielska terminologia), przy czym warto podkreślić, że zajęcia te prowadzone były również dla studentów spoza macierzystego wydziału Habilitantki. Dla części tych zajęć dr Trzęsowska-Kruszyńska przygotowywała program oraz opracowywała materiały dydaktyczne. Oprócz tego habilitantka była opiekunem roku oraz jest kierownikiem laboratorium z chemii ogólnej i nieorganicznej dla studentów kierunku Chemia i Technologia Chemiczna.

Była promotorem 6 prac magisterskich i jednej pracy inżynierskiej, opiekunem projektów naukowych, a także opiekuje się doktorantką w Zespole Rentgenografii Strukturalnej i Krystalochemii.

Działalność organizacyjna Habilitantki jest typowa – a chyba nawet ponadprzeciętna – dla tego etapu rozwoju kariery: jest członkiem (od 2010 zastępcą przewodniczącego) Wydziałowej Komisji Rekrutacyjnej, Komisji Kierunkowej dla kierunku Chemia (program kształcenia itd.), a także kierowała przygotowaniem aplikacji o przedłużenie certyfikatu „ECTS Label”.

Zaangażowanie w dydaktykę oraz działalność organizacyjną p. dr Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej oceniam jako ponadprzeciętne.

Konkluzja

Wysoko oceniam aktywność naukową dr Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej oraz inne aspekty jej działalności. Szczególnie dobre wrażenie zrobił na mnie cykl jednoautorskich prac, stanowiący zgłoszone osiągnięcie naukowe. Wydaje się, że Habilitantka jest na etapie szybkiego rozwoju naukowego i faktycznie jest już samodzielnym pracownikiem naukowym, a więc habilitacja jest tylko potwierdzeniem tego faktu.

Stwierdzam, że przedstawione mi do oceny materiały dotyczące dr Agaty Trzęsowskiej-Kruszyńskiej stanowią wystarczającą podstawę do ubiegania się przez nią o stopień doktora habilitowanego. Moim zdaniem, wypełniają one zarówno wymogi Ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz.U. nr 65, poz. 595 z późn. zm.), jak i Rozporządzenia Ministra nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 1 września 2011 w sprawie kryteriów oceny osiągnięć osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego (Dz.U. nr 196, poz. 1165).

Maciej Kied